

**UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE**  
**FACULTAD DE CIENCIA**  
**Departamento de Física**



**Interacción magnetostática entre  
nanoestructuras cilíndricas**

**Cristopher Antonio Morales Concha**

Profesor Guía: Juan Escrig Murúa

Tesis para optar al grado de  
Doctor en Ciencia con Mención en Física

Santiago – Chile

2017



Este trabajo de graduación fue preparado bajo la supervisión del profesor guía Juan Escrig Murúa del Departamento de Física de la Universidad de Santiago de Chile, y ha sido aprobado por los miembros de la comisión calificadora

Dr. Juan Escrig	.....
Dr. Juliano Denardin	.....
Dr. Jorge Gamboa	.....
Dr. Fernando Méndez	.....
Dr. Álvaro Núñez	.....
Dr. Mikhail Plyushchay	.....

.....  
Director del Departamento de Física

# Resumen

Arreglos de nanopartículas magnéticas cilíndricas han sido intensamente investigados durante las últimas dos décadas. Además del interés científico en las propiedades magnéticas de estos sistemas, existe evidencia de que éstos podrían ser usados en la producción de nuevos dispositivos magnéticos, tales como medios de grabación magnéticos de alta densidad. Su comportamiento magnético engloba las características de las partículas individuales como también de las interacciones magnetostáticas entre los elementos. Los efectos de la interacción entre nanopartículas son, en general, complicados debido a que el campo dipolar depende del estado de magnetización de cada elemento, que a su vez depende del campo producido por los elementos adyacentes. Por lo tanto, investigar arreglos interactuantes de partículas siempre es un gran desafío.

En esta tesis se presentará una expresión general para la interacción magnetostática entre partículas con forma cilíndrica, bajo la suposición que ambas partículas están paralelas, y la dirección de magnetización es fija y paralela al eje de simetría de cada una de ellas. Además, de la expresión anterior se ha obtenido la fuerza magnetostática entre dos nanopartículas con forma cilíndrica. Ambas expresiones generales permiten la investigación de las interacciones y fuerzas magnetostáticas entre partículas cilíndricas con diferentes parámetros geométricos tales como nanoestructuras magnéticas tipo código de barras, nanohilos y nanotubos multicapas, nanoestructuras con diámetro modulado, el ordenamiento de nanoestructuras en fluidos y otros.

Por otro lado, se presentará una expresión analítica para la interacción magnetostática entre nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado, nuevamente bajo la suposición de que ambas nanopartículas están paralelas, y la dirección de sus vectores de magnetización es fija y paralela al eje de simetría de cada una de ellas. Cabe mencionar que el campo magnetostático producido por una nanopartícula cilíndrica homogénea es más intenso en sus extremos. Así, en una nanoestructura con diámetro modulado, la presencia de superficies horizontales adicionales produce un aumento en la intensidad del campo magnetostático. Esto conlleva a esperar que si bien los tubos delgados interactúan más débilmente que un tubo más grueso, debido a la presencia de modulaciones en el diámetro esto puede dejar de ser válido: las superficies horizontales dan origen a campos magnetostáticos locales más intensos que aumentan la interacción magnetostática entre

nanopartículas vecinas.

Finalmente se presentará una expresión analítica para la interacción magnetostática entre las dos fases magnéticas que componen un sistema bifásico, cuando una de ellas está revirtiendo su magnetización. Debido a su geometría, las fases internas y externas pueden estar lo suficientemente cerca entre ellas para interactuar mediante un acoplamiento dipolar. Esta interacción puede producir nuevos estados magnéticos para una partícula cilíndrica como un todo, los que pueden ser usados para potenciales aplicaciones en espintrónica, multiferróicos, etc. Además, se puede esperar la aparición de nuevas propiedades magnéticas, como el desplazamiento magnético dipolar. La posibilidad de obtener un comportamiento similar al de una válvula de espín es muy atractivo debido a sus potenciales aplicaciones para medir campos magnéticos en sistemas de grabación magnéticos.

# Abstract

Cylindrical magnetic particle arrays have been intensively investigated over the past two decades. In addition to the scientific interest in the magnetic properties of these systems, there is evidence that they could be used in the production of new magnetic devices or as high-density magnetic recording media. Their magnetic behavior encompasses the magnetic characteristics of the individual particles as well as the intensity of the magnetostatic interactions between the elements. The effects of interaction between particles are generally complicated by the fact that the dipole field depends on the state of magnetization of each element, which in turn depends on the field produced by the adjacent elements. Therefore, investigating interacting arrays of particles is always a great challenge.

In this thesis we present a general expression for the magnetostatic interaction between particles with cylindrical shape. Let us assume that both particles are parallel, and that the direction of their magnetization vectors is fixed and parallel to the axis of symmetry of each of them. In addition, we obtained the magnetostatic force between two nanoparticles with cylindrical shape. These general expressions allow the investigation of the interactions and magnetostatic forces between cylindrical particles with different geometric parameters such as magnetic barcode type nanostructures, multilayer nanowires and nanotubes, nanostructures with modulated diameter, nanostructures ordering in fluids and others.

On the other hand, we will present an analytical expression for the magnetostatic interaction between cylindrical nanoparticles with modulated diameter. Again we will assume that the particles are parallel, and that the direction of their magnetization vectors is fixed and parallel to the axis of symmetry of each of them. It is interesting to remember that the magnetostatic field produced by a homogeneous cylindrical nanoparticle is more intense at its ends. Thus, in a nanostructure with modulated diameter, the presence of additional horizontal surfaces produces an increase in the intensity of the magnetostatic field in the modulations. This implies that although thinner tubes are expected to interact more weakly than a thicker tube, this may no longer be valid due to the presence of modulations in diameter: horizontal surfaces give rise to more intense local magnetostatic fields that increase the magnetostatic interaction between neighboring nanoparticles.

Finally we present an analytical expression for the magnetostatic interaction between

the two magnetic phases that make up a biphasic system, when one of them is reversing its magnetization. Because of their geometry, the internal and external phases may be close enough to each other to interact through a dipolar coupling. This interaction can produce new magnetic states of the cylindrical particle as a whole, which can be used for potential applications in spintronics, multiferroics, etc. In addition, new magnetic properties such as dipolar magnetic bias can be expected. The ability to obtain spin-like behavior is very attractive because of its potential applications for sensing magnetic fields in magnetic recording systems.

*Para mi mamá, mi mami y la dani*

# Agradecimientos

En estas pocas palabras quiero agradecer a toda la gente que hizo posible el poder culminar esta etapa de mi vida.

Comenzaré agradeciendo a mi tutor, el Dr. Juan Escrig y su apoyo a lo largo de todo el tiempo que hemos trabajado juntos y por ayudar a ordenar mi constante divergencia (traté que no fuera como el primer póster, si no resultó acomodar a conciencia).

Agradezco también a los profesores del doctorado, el profesor Jorge Gamboa, el profesor Fernando Méndez, el profesor Mikhail Plyushchay, la profesora Dora Altbir, el profesor Justo López y al profesor Iaroslav Ispolatov por su apoyo y darme las herramientas que me permitieron avanzar.

Quiero agradecer también a los profesores Eugenio Vogel y Eduardo Cisternas que me apoyaron mucho cuando estuve trabajando en Temuco, del mismo modo extendiendo los agradecimientos a los profesores Manuel Vázquez y Rafael Pérez y a los compañeros que tuve en el ICMM-CSIC que me acogieron y enseñaron muchas cosas durante mi estancia en España. Igualmente agradecer a la Vero y al Paul, mis papás adoptivos, por apoyarme como no tienen idea y por su amistad.

Al personal del Departamento de Física, a la señorita Erika, Emelina, la señora Paty, la señorita Susana y la señora Leito por apoyarme cuando necesité ayuda, guiarme cuando tenía que realizar trámites y ese tipo de cosas.

A mis compañeros del doctorado Álvaro, Diego, Juan Francisco, Juan Luis, Sebastián, Alejandro y especialmente a la Rosita, gracias a ella pude aprender látex en tiempo récord.

A mis amigos la profe Anita, Claudia Durán, la profe Marcia, el profe Juan Carlos, el profe Manuel, la profe Myriam y el profe Jiménez, son mi pandilla y lo paso genial a su lado.

A mis amigos, la Vivi, el Mamu, la Marion y a Sempi, especialmente a Sempi que me ayudó cuando tenía mis crisis látex o cuando mi pendrive murió o simplemente látex decidió no compilar.

A mi familia, no los nombraré a todos ya que somos más que los pokemones, pero sepan que los quiero a todos y mucho. Quiero agradecer especialmente a mi Nino Polo y a mi tía Gladis por apoyarme cuando lo necesité, pero por sobre todo quiero agradecer a mi mamá su infinita paciencia, sé que soy complicado pero gracias por aguantarme.

Si alguien se sintió olvidado en estos agradecimientos, no se ofenda, sólo que no me alcanzaba la memoria y el lenguaje para expresarme.

Gracias a la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (**CONICYT**) por financiar mis estudios de doctorado en Chile, mi beca de extensión, y una beca de pasantía en el extranjero. También agradezco a la Beca de Apoyo a la Investigación entregada por la Universidad de Santiago de Chile (**UdeSantiago**), a FONDECYT (Nos. 1110784 y 1080330), al Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología (**CEDENA**) a través del financiamiento Basal FB0807 y al Grupo Milenio *Magnetismo Básico y Aplicado* a través del proyecto P10-061-F.

# Tabla de Contenido

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Introducción al magnetismo . . . . .	3
1.1.1	Materiales magnéticos . . . . .	5
1.2	Espintrónica . . . . .	6
1.3	Dominios y paredes de dominio . . . . .	7
1.3.1	Propagación de paredes mediante campos magnéticos . . . . .	10
1.3.2	Propagación de paredes mediante corrientes polarizadas en espín . . . . .	12
1.3.3	Nucleación, propagación y control de paredes de dominio . . . . .	13
1.3.4	Aplicaciones de las paredes de dominio . . . . .	16
1.3.4.1	Almacenamiento de información . . . . .	16
1.3.4.2	Memoria magnética tipo pista de carrera (racetrack memory). . . . .	17
1.3.4.3	Funciones lógicas . . . . .	18
1.3.5	Paredes de dominio en estructuras cilíndricas . . . . .	19
1.4	Interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas . . . . .	20
1.5	Estructura de la tesis . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Micromagnetismo</b>	<b>23</b>
2.1	Aproximación al continuo . . . . .	23
2.2	Energías involucradas . . . . .	24
2.2.1	Energía de Zeeman . . . . .	25
2.2.2	Energía de intercambio . . . . .	26
2.2.3	Energía magnetostática . . . . .	27
2.2.3.1	Esfera físicamente pequeña . . . . .	27
2.2.3.2	Campo demagnetizante . . . . .	30
2.2.3.3	Interacción dipolar entre dos partículas . . . . .	31
2.2.4	Energía de anisotropía . . . . .	32
2.2.4.1	Anisotropía uniaxial . . . . .	32
2.2.4.2	Anisotropía cúbica . . . . .	33
2.2.4.3	Anisotropía ortorrómbica . . . . .	34
2.2.4.4	Anisotropía superficial . . . . .	35
2.2.5	Energía magnetoelástica y magnetoestricción . . . . .	37

2.3	Ecuación de movimiento . . . . .	38
2.3.1	Energía libre total . . . . .	39
2.3.2	Dinámica de la magnetización . . . . .	39
2.3.3	Simulaciones micromagnéticas . . . . .	41
2.3.3.1	OOMMF . . . . .	41
2.3.3.2	Magpar . . . . .	41
2.3.3.3	GP Magnet . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Fuerza e interacción magnetostática entre nanoestructuras con forma cilíndrica</b>	<b>44</b>
3.1	Introducción . . . . .	44
3.2	Energía magnetostática . . . . .	45
3.2.1	Aproximación para sistemas cilíndricos largos . . . . .	46
3.3	Fuerza magnetostática . . . . .	46
3.4	Resultados y discusión . . . . .	47
3.5	Conclusión . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Interacción magnetostática entre nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado</b>	<b>50</b>
4.1	Introducción . . . . .	50
4.2	Energía magnetostática . . . . .	51
4.2.1	Aproximación para sistemas sin modulación . . . . .	51
4.3	Resultados y discusión . . . . .	52
4.4	Conclusión . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Interacción magnetostática entre sistemas bifásicos</b>	<b>54</b>
5.1	Introducción . . . . .	54
5.2	Interacción magnetostática . . . . .	55
5.3	Resultados y discusión . . . . .	56
5.4	Conclusión . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Conclusión general</b>	<b>58</b>
	<b>Referencias Bibliográficas</b>	<b>59</b>
<b>A</b>	<b>Constantes magnéticas</b>	<b>63</b>
<b>B</b>	<b>Cálculo de la energía de interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas con diámetro modulado</b>	<b>64</b>

# Índice de Tabla

1.1	Estimación del camino libre medio y la longitud de difusión de espín en nanómetros. . . . .	7
2.1	Proporción del número de átomos en la superficie de un cluster nanoscópico.	37
A.1	Constantes magnéticas para algunos materiales ferromagnéticos. . . . .	63

# Índice de Ilustraciones

1.1	a) Gráfico original [Moore, 2006] y b) actualización del gráfico anterior hasta el año 2010. . . . .	1
1.2	Incremento de la capacidad de almacenamiento, en escala logarítmica, de información de un disco duro como función del tiempo. . . . .	2
1.3	Esquema de la clasificación de los materiales magnéticos. Cabe mencionar que estas clases son las principales y que por lo mismo existen otras que no han sido consideradas en esta tesis debido a que exceden los propósitos de la misma. . . . .	5
1.4	a) Curva de histéresis y b) magnetización como función de la temperatura de un material ferromagnético. En la curva de histéresis se destaca la magnetización de saturación (a), la magnetización remanente (b) y el campo coercitivo (c). . . . .	8
1.5	Pared de dominio a $180^\circ$ (a) y a $90^\circ$ (b). . . . .	9
1.6	Pared de dominio tipo Bloch (a) y tipo Néel (b). . . . .	9
1.7	Velocidad de propagación de la pared de dominio normalizada a $v_{max} = v(H_w)$ como función del campo aplicado normalizado al campo de Walker $H_w$ . . . . .	10
1.8	Evolución de una memoria tipo pista de carrera si se utilizará un campo magnético como motor para el movimiento de paredes de dominio. . . . .	12
1.9	Evolución de una memoria tipo pista de carrera si se utilizará una corriente polarizada en espín como motor para el movimiento de paredes de dominio. . . . .	13
1.10	Energía de una pared de dominio tipo vórtice (izquierda) y transversal (derecha) como función de la posición de la pared dentro de un tubo con diferentes radios. . . . .	14
1.11	a) Imagen SEM de tres cintas de Permalloy: la primera es lisa, la segunda tiene trampas y la tercera tiene trampas más separadas. b) Velocidad de propagación de la pared de dominio como función del campo magnético aplicado para cada cinta. . . . .	15
1.12	Imagen SEM de un arreglo de nanohilos modulados. . . . .	16
1.13	La información que está fija en el disco avanza bajo el cabezal, mientras que la corriente inducida sobre éste pasa a ser interpretada como información. . . . .	17

1.14	Esquema de memoria tipo pista de carrera. Debajo de la cinta se encuentran el cabezal de lectura y de escritura. Además, una corriente polarizada en espín (simbolizada por $e^-$ desplaza las paredes de dominio para poder leer la información. . . . .	18
1.15	a) Operación de negación, b) puerta AND, c) salida de una puerta, d) entrecruzamiento y e) circuito demostrativo, donde se mezclan algunas de las operaciones mostradas anteriormente. . . . .	19
1.16	Esquema de los modos de reversión en nanoestructuras cilíndricas. . . . .	20
2.1	Representación esquemática del sistema. $\vec{r}'$ representa un punto dentro del material, $S'$ es la superficie del material y $\tau'$ es su volumen. . . . .	24
2.2	Momentos magnéticos en ausencia (a) y en presencia (b) de un campo magnético externo. . . . .	25
2.3	Esquema de la aproximación de la esfera físicamente pequeña. El campo fuera de la esfera es continuo mientras que el campo dentro de la esfera es discreto y uniforme. . . . .	28
2.4	Esquema de dos partículas interactuantes. . . . .	31
2.5	Esquema para la anisotropía uniaxial. Cuando $K_1 > 0$ se obtiene un eje de fácil magnetización (flechas negras), mientras que cuando $K_1 < 0$ se obtiene un plano de fácil magnetización (flecha roja). . . . .	33
2.6	Anisotropía cúbica con $K_c > 0$ (a) y $K_c < 0$ (b). . . . .	34
2.7	Esquema del número de coordinación que exhiben los diferentes átomos de una superficie [Guimarães, 2009]. . . . .	36
2.8	Comparación entre OOMMF y Magpar . . . . .	42
2.9	Tiempo que demora OOMMF y GPMagnet en avanzar un paso temporal en la simulación de una película de níquel como función del número de elementos. . . . .	43
3.1	Parámetros geométricos y posición relativa de las partículas cilíndricas interactuantes. . . . .	45
3.2	Parámetros geométricos del sistema investigado. Dado que el diámetro interno del tubo es mayor que el diámetro externo del hilo, se analizará la posibilidad de encapsular un hilo dentro de un tubo por efecto magnetostático. . . . .	47
3.3	Energía de interacción de las dos nanopartículas interactuantes: un nanotubo largo de Ni con $L_1 = 1500$ [nm], $R_1 = 250$ [nm] y $a_1 = 200$ [nm], y un nanohilo pequeño con $L_2 = 500$ [nm] y $R_2 = 100$ [nm]. $x = 0$ [nm] ha sido fijado, mientras que $y$ puede variar. . . . .	47
3.4	Fuerza de interacción de dos nanopartículas interactuantes: un nanotubo largo de Ni con $L_1 = 1500$ [nm], $R_1 = 250$ [nm] y $a_1 = 200$ [nm], y un nanohilo pequeño con $L_2 = 500$ [nm] y $R_2 = 100$ [nm]. $x = 0$ [nm] ha sido fijado, mientras que $y$ puede variar. . . . .	48

4.1	Parámetros geométricos y posición relativa de dos nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado que interactúan entre ellas. . . . .	51
4.2	Interacción magnetostática entre dos nanohilos homogéneos de níquel con un radio $R = 50$ [nm] y una longitud de $L = 1000$ [nm] como función de la distancia entre ellos. . . . .	52
4.3	Interacción magnetostática entre dos nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado como función de la distancia entre ellos. En a) se varió $\alpha$ mientras que en b) se varió $\beta$ . . . . .	53
5.1	Esquema y parámetros geométricos de un sistema bifásico. . . . .	55

# Capítulo 1

## Introducción

En el año 1965 Gordon Moore [Moore, 2006] postuló la ley que lleva su nombre, de carácter empírica, que establece que la cantidad de transistores dentro de un circuito integrado se duplica cada aproximadamente dos años.

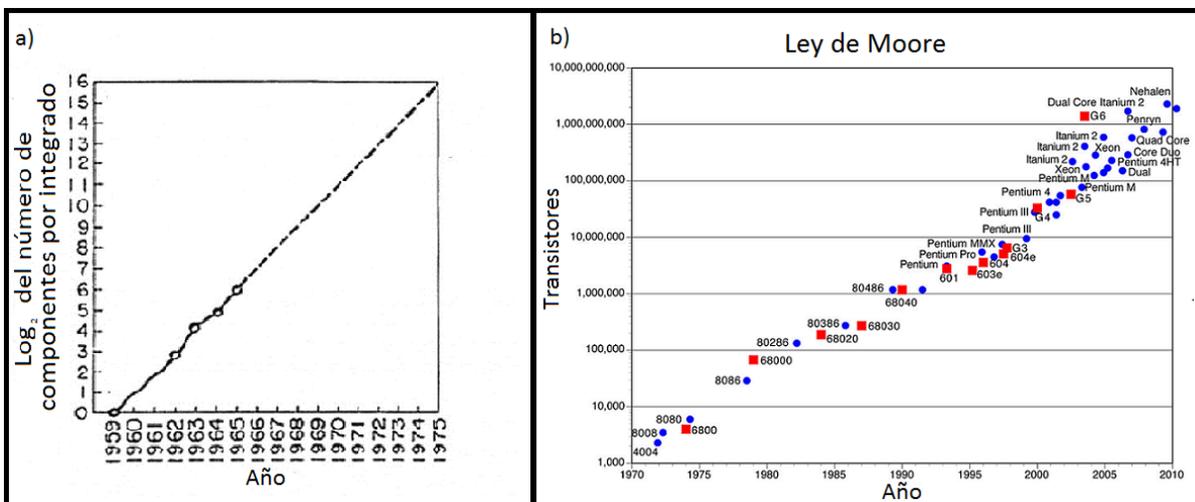


Figura 1.1: a) Gráfico original [Moore, 2006] y b) actualización del gráfico anterior hasta el año 2010.

Algunas de las consecuencias de la Ley de Moore son las siguientes:

- La complejidad. Esto debido a que tras cada ciclo la cantidad de componentes dentro de un sistema integrado aumenta.
- El costo. Un sistema integrado, en el siguiente ciclo de Moore, baja su precio debido a que existe disponible otro con mejores prestaciones.

- La obsolescencia. Un sistema integrado, después de tres o cuatro ciclos de Moore, quedará obsoleto para realizar la función para la cual fue creado originalmente<sup>1</sup>.

Dado que los circuitos integrados son cada vez más complejos, la cantidad de información que estos generan y deben almacenar es mayor. Es por ello que la tecnología de almacenamiento de información también ha evolucionado, recibiendo el nombre de Ley de Kryder, que viene a ser el análogo de la Ley de Moore. En particular, la utilización de materiales magnéticos como sistemas de almacenamiento de la información ha permitido aumentar la densidad de grabación.

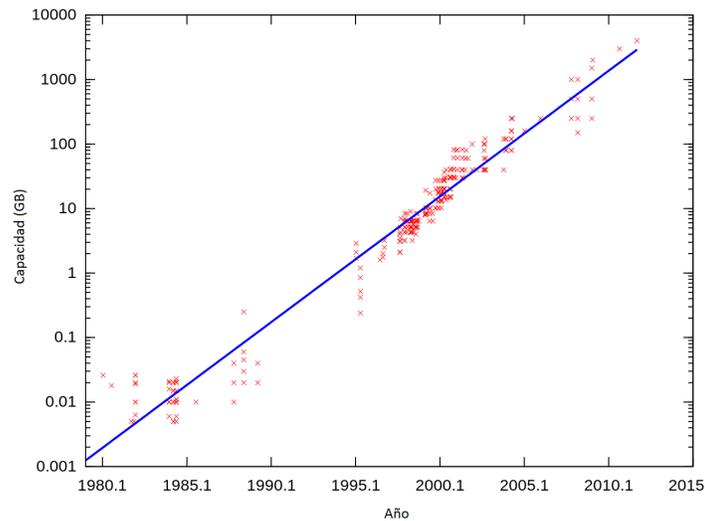


Figura 1.2: Incremento de la capacidad de almacenamiento, en escala logarítmica, de información de un disco duro como función del tiempo.

A partir de la Fig. 1.2 se aprecia claramente que la capacidad de almacenamiento de información de los discos duros se incrementa de forma exponencial. Evidentemente la cantidad de información que se puede almacenar por pulgada cuadrada de sustrato no es infinita, hay limitaciones físicas que impiden esto. Hoy en día, un disco duro convencional tiene regiones magnetizadas (dominios magnéticos) cuyo tamaño es del orden de los micrómetros ( $10^{-6}[m]$ ). Para aumentar la densidad de almacenamiento de información se piensa implementar medios de grabación perpendiculares cuyos diámetros son del orden de los nanómetros ( $10^{-9}[m]$ ). La interacción entre nanoestructuras magnéticas de este tamaño es el objetivo de esta tesis.

<sup>1</sup>Hoy en día, no se usaría un PENTIUM IV como procesador de un computador, sin embargo, estos procesadores aún pueden ser usados en equipos con menor capacidad de procesamiento como lavadoras, cámaras de vigilancia, calculadoras, etc.

Sin embargo, con miras a la siguiente evolución de los discos duros, ya se ha trabajado en el almacenamiento de información a nivel atómico [Kalff et al., 2016](atomic data storage). En estos sistemas, se puede almacenar un bit de información en un átomo (por ejemplo, átomo de cloro). Las restricciones que este tipo de sistemas presentan son de dos tipos:

- la interacción entre estas estructuras puede modificar sus estados, lo que conlleva a la pérdida de información.
- El sistema requiere de una temperatura de  $77[K]$  para funcionar, mientras que los sistemas micro y nanométricos podrían funcionar a temperatura ambiente.

Es evidente que el constante progreso tecnológico va en esta dirección, pero antes de tener un dispositivo de almacenamiento atómico, se deberá pasar por medios de grabación perpendiculares. Estos medios perpendiculares son objeto de constante investigación, y es justamente este tema el que motiva el desarrollo de esta tesis doctoral.

## 1.1. Introducción al magnetismo

Los estudios científicos más antiguos de la humanidad describen que en la región de Magnesia, en Asia menor, existía una “piedra” que tenía la extraordinaria capacidad de atraer pequeños objetos. De esta forma, el origen de la palabra magnetismo proviene de Magnesia. Las primeras descripciones y explicaciones de este fenómeno fueron dadas por los filósofos griegos, tales como: Platón, Thales de Mileto, Aristóteles, etc. Además, mucho antes de estas explicaciones, en China, ya existía la primera aplicación práctica del magnetismo, la brújula.

Posteriormente, en 1600, William Gilbert publicó el primer estudio científico sobre esta disciplina. En él separa claramente los fenómenos eléctricos de los magnéticos y acuña los conceptos de fuerza eléctrica, fuerza magnética y polos magnéticos. Esta separación fue disuelta posteriormente con el experimento de Hans Christian Oersted, quien en 1819 demostró que una corriente eléctrica produce un campo magnético. Esto dio origen a los electroimanes, los cuales tenían un mayor poder atractivo que los imanes naturales, pero a un mayor costo. En 1830 Michael Faraday descubrió que la variación de un campo magnético produce una corriente en una bobina. Además, él inventó el dínamo (generador) y construyó los primeros motores. El posterior desarrollo de los motores impulsó la investigación en el campo de los imanes permanentes, y de esta forma, poder construir un imán sintético con potencia similar o superior a la de un electroimán era todo un desafío. Con los trabajos de Oersted y Faraday se demostró que la electricidad y el magnetismo son manifestaciones de un mismo fenómeno, dando origen al electromagnetismo.

En 1873, James Clerk Maxwell publica *A Treatise on Electricity and Magnetism (Tratado sobre electricidad y magnetismo)* donde unifica matemáticamente las fuerzas eléctricas y magnéticas. Las ecuaciones de Maxwell originales fueron escritas en término de cuaterniones, formando un sistema de veinte ecuaciones con veinte incógnitas. Posteriormente, el mismo Maxwell las redujo a trece. En 1884, Heaviside transformó aquellas 20 ecuaciones cuaterniónicas en las cuatro ecuaciones vectoriales que conocemos hoy en día. Después de los trabajos de Maxwell y Heaviside, los progresos en el electromagnetismo fueron también llevados a la industria, los motores, la generación de electricidad, las telecomunicaciones, las señales satelitales, etc. Hoy en día, uno de los factores principales que incentivan la investigación en materiales magnéticos es la computación, ya que la cantidad de información que se quiere almacenar por unidad de área va en notorio aumento (ver Fig. 1.2).

### 1.1.1. Materiales magnéticos

En general se pueden clasificar los materiales magnéticos en dos grandes familias: aquellos cuyos átomos o iones constituyentes no poseen un momento magnético permanente, y aquellos que sí. Dentro de estos últimos, se pueden distinguir aquellos materiales que no poseen un ordenamiento de largo alcance con aquellos que sí (a bajas temperaturas<sup>2</sup>). Finalmente, se podrían clasificar éstos últimos según el patrón de alineamiento que los momentos magnéticos exhiben. Toda esta clasificación se puede ordenar según el siguiente esquema [Stancil and Prabhakar, 2009]:

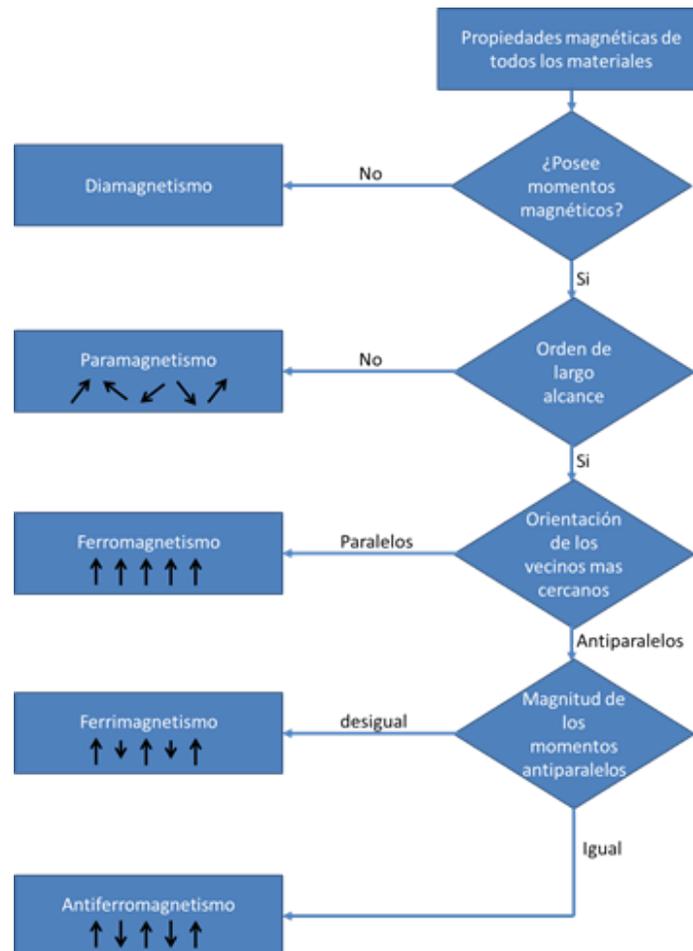


Figura 1.3: Esquema de la clasificación de los materiales magnéticos. Cabe mencionar que estas clases son las principales y que por lo mismo existen otras que no han sido consideradas en esta tesis debido a que exceden los propósitos de la misma.

<sup>2</sup>Respecto de la temperatura crítica.

Esta tesis está enfocada en los materiales ferromagnéticos, es decir, aquellos materiales que tienen momentos magnéticos permanentes y que exhiben un orden de largo alcance, que alinea los momentos magnéticos y los deja paralelos entre sí.

## 1.2. Espintrónica

La espintrónica es aquella parte de la electrónica que además de usar la carga del electrón, también ocupa la propiedad cuántica del espín. La espintrónica es una tecnología emergente que promete incrementar la funcionalidad de los futuros dispositivos, a partir de las siguientes características:

- No volatilidad, es decir, conservan la memoria en ausencia de suministro eléctrico.
- Alta densidad de almacenamiento de información.
- Alta velocidad de funcionamiento de los dispositivos.

Estas características los hace particularmente atractivos para aplicaciones portátiles, así como para el futuro uso de implantes biomédicos y computación sin cables. El espín del electrón es el responsable del magnetismo, de modo que la mayor parte de la investigación de la espintrónica se centra en la comprensión del comportamiento magnético de estructuras y dispositivos de tamaño nanométrico.

Es lógico pensar que las limitaciones de velocidad, en la mayoría de estos dispositivos, son impuestas por la velocidad a la que un estado de información (por ejemplo, un 1 binario) se puede cambiar a otro (por ejemplo, un 0 binario). Uno de los desafíos para los dispositivos espintrónicos que implican materiales ferromagnéticos, es conocer el mecanismo mediante el cual el sentido de la magnetización se puede invertir. Por ejemplo, todos los espines dentro del elemento rotarán al mismo tiempo (rotación coherente) o una parte nucleará una pared la que posteriormente se propagará al resto del elemento?. A partir de este último mecanismo se puede inducir la formación de paredes de dominio. Para investigar el proceso de reversión de la magnetización se utilizan una serie de técnicas tanto experimentales como teóricas [Salazar-Aravena et al., 2013, Parkin et al., 2008, Allwood et al., 2005, Landeros et al., 2007]). Las paredes de dominio magnéticas pueden ser consideradas como nanoestructuras estables auto-ensambladas, que pueden ser creadas o aniquiladas por acción externa. La manipulación de paredes de dominio ha sido propuesta como una manera de almacenar información [Parkin et al., 2008] o incluso realizar funciones lógicas [Allwood et al., 2005].

Se ha propuesto que la propagación de paredes de dominio se realice mediante corrientes espín polarizadas. Dado que la conducción eléctrica es un proceso difusivo, el

camino libre medio entre dos dispersiones sucesivas es diferente para electrones  $\uparrow$  y  $\downarrow$  en un ferromagneto. Esto fue explicado por Mott [Mott, 1936] en su modelo de las dos corrientes, donde la conductividad para cada canal es proporcional a su camino libre medio  $\lambda_{\downarrow}$  o  $\lambda_{\uparrow}$ . La siguiente tabla muestra este efecto:

Tabla 1.1: Estimación del camino libre medio y la longitud de difusión de espín en nanómetros.

	Al	Fe	Co	Ni	Ni <sub>80</sub> Fe <sub>20</sub>	Cu
$\lambda_{\downarrow}$	12	8	20	5	15	20
$\lambda_{\uparrow}$	12	8	1	1	1	20

### 1.3. Dominios y paredes de dominio

Cuando a un material se le aplica un campo magnético,  $\vec{H}$ , éste adquiere una magnetización distinta de cero (independientemente de que existan, como vimos anteriormente, materiales que exhiben magnetización sin campo externo). La magnetización del material,  $\vec{M}$ , son los momentos magnéticos por unidad de volumen. En la mayoría de los materiales,  $\vec{H}$  y  $\vec{M}$  son proporcionales y esta relación generalmente se escribe de la siguiente forma:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}, \quad (1.1)$$

donde  $\chi$  es la susceptibilidad magnética del material. Se cumple que para materiales paramagnéticos,  $\chi > 0$ , y en materiales diamagnéticos,  $\chi < 0$ . Las ecuaciones de Maxwell son usualmente escritas en términos del vector de inducción  $\vec{B}$ , el que puede escribirse de la siguiente forma:

$$\vec{B} = \mu_0 \left( \vec{H} + \gamma_b \vec{M} \right), \quad (1.2)$$

donde  $\gamma_b$  es un valor introducido por Brown que depende del sistema de unidades en que se trabaje, es decir, 1 en el SI y  $4\pi$  en el sistema CGS. Si se reemplaza la Ec. 1.1 en la Ec. 1.2 tendremos que:

$$\vec{B} = \mu \vec{H}, \quad (1.3)$$

donde  $\mu = \mu_0 (1 + \gamma_b \chi)$  es la permeabilidad magnética. Es importante señalar que la Ec. 1.3 no es válida para los materiales ferromagnéticos. En particular, la Fig. 1.4 a) muestra la curva de histéresis que exhibe un material ferromagnético, que no es otra cosa que la relación existente entre la magnetización y el campo magnético aplicado. A partir de la Fig. 1.4 b) se puede apreciar que la magnetización de un material ferromagnético depende fuertemente de la temperatura. De hecho, a partir de la gráfica se desprende que al aumentar

la temperatura hasta una temperatura crítica ( $T_c$ ), se producirá un cambio de fase desde una configuración ferromagnética a otra paramagnética, en cuyo caso la magnetización se anulará.

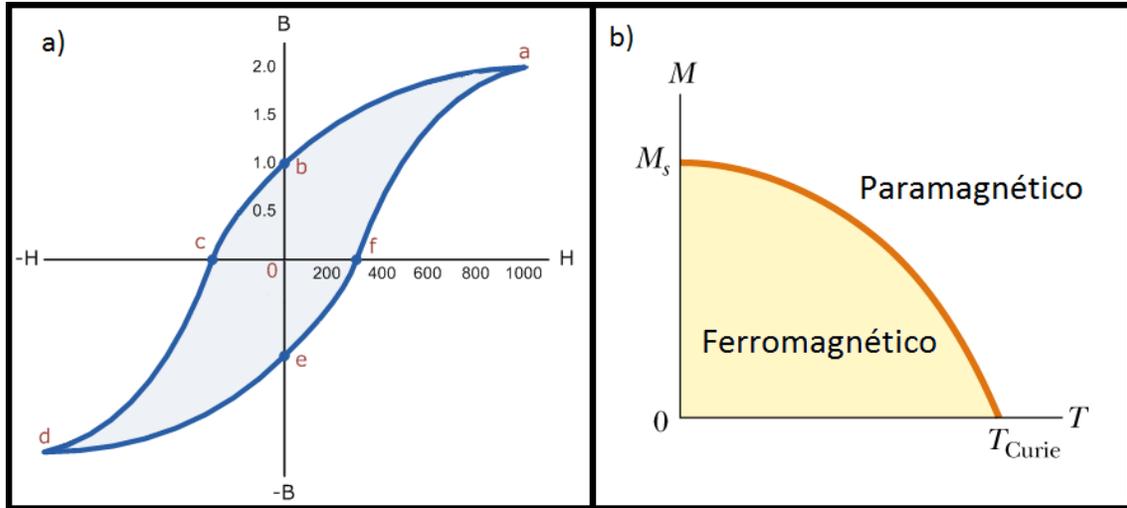


Figura 1.4: a) Curva de histéresis y b) magnetización como función de la temperatura de un material ferromagnético. En la curva de histéresis se destaca la magnetización de saturación (a), la magnetización remanente (b) y el campo coercitivo (c).

Toda teoría que quiera explicar el ferromagnetismo, tiene que ser capaz de describir ambos comportamientos en forma simultánea (ver Figs. 1.4 a) y b)). En general, muchas teorías eran capaces de explicar bien una parte, pero ignoraban la otra o la describían con menor precisión. El primer físico que propuso una explicación teórica para el comportamiento de los materiales ferromagnéticos fue Pierre Weiss en 1907 [Weiss, 1907], quien propuso que estos materiales estaban compuestos por *dominios magnéticos*, regiones acotadas dentro del material donde la magnetización es uniforme, es decir, donde todos los momentos magnéticos están alineados en forma paralela y apuntando en el mismo sentido. Además, a la frontera entre dos dominios adyacentes la denominó *pared de dominio*. En 1919, Barkhausen [Barkhausen, 1919] demuestra experimentalmente que estos dominios existen.

En 1932, Bloch [Bloch, 1932] realizó una descripción de las transiciones entre dominios magnéticos usando láminas magnéticas. Desde su descubrimiento se consideró que la contribución energética de las paredes de dominio era despreciable, dado que el volumen de ellas es pequeño en comparación al de los dominios que separa, sin embargo en 1935, al calcular la energía de una estructura formada por dos dominios, Landau y Lifshitz [Landau and Lifshitz, 1935] determinaron que la energía de intercambio es me-

nor cuando el cambio en la orientación de la magnetización dentro de la pared es suave, concluyendo así que las paredes de dominio tienen una estructura interna.

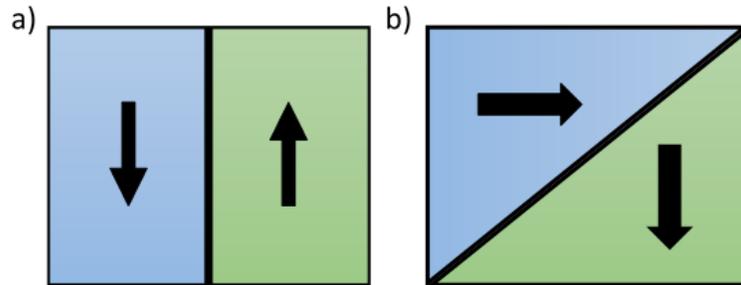


Figura 1.5: Pared de dominio a 180° (a) y a 90° (b).

Posteriormente, en la década de los 40's, Brown comenzó a trabajar en la *Teoría de la magnetización* [Brown, 1939, Brown, 1940, Brown, 1953]. En 1944, y de manera independiente, Néel ([Néel, 1944]) y Lifshitz ([Lifshitz, 1944]) resolvieron las ecuaciones planteadas por Brown para una pared de dominio de 180°, para lo cual determinaron el ancho y la energía de equilibrio de un ferromagneto unidimensional. Néel supuso que el cambio en la orientación de la magnetización de la pared de dominio se realizaba en el plano (pared de Néel), en cambio, Lifshitz consideró que dicho cambio ocurría fuera del mismo (pared de Bloch).

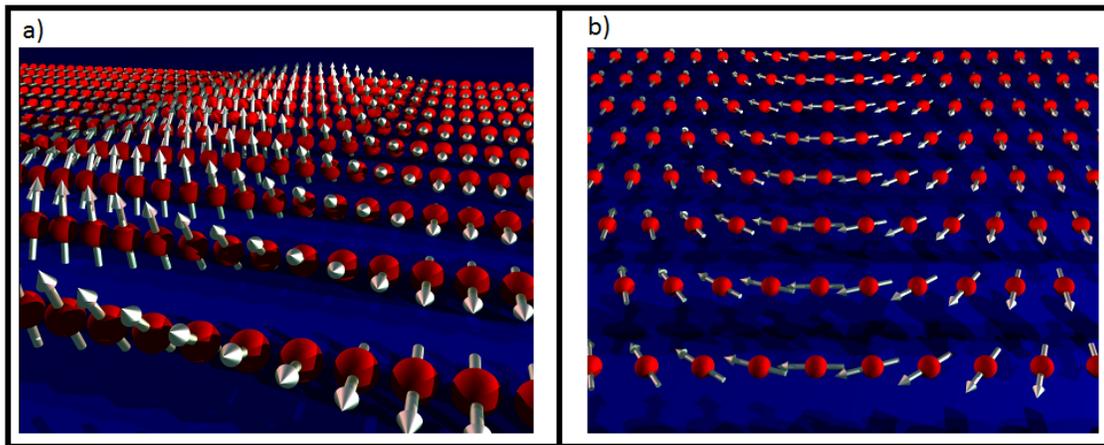


Figura 1.6: Pared de dominio tipo Bloch (a) y tipo Néel (b).

En 1959, Brown [Brown, 1959] analiza las paredes de dominio desde un punto de vista micromagnético y, posteriormente en 1963, el mismo Brown escribe el libro homónimo

Micromagnetics [Brown, 1963], y entonces la *Teoría de la magnetización* pasa a llamarse *Micromagnetismo*<sup>3</sup>.

### 1.3.1. Propagación de paredes mediante campos magnéticos

La velocidad de propagación de una pared de dominio es una función no lineal del campo magnético que muestra tres regiones bien definidas (ver Fig. 1.7). La región I, definida para el rango  $H < H_W$ , donde  $H_W$  es el campo de la caída de Walker<sup>4</sup>, muestra que la pared de dominio, con una distribución de espín estacionaria, se mueve a velocidad uniforme como función del campo magnético externo aplicado:  $v = SH$ , donde  $S$  es la movilidad y  $H$  es la intensidad del campo magnético. La movilidad está dada por  $S = \gamma\Delta/\alpha$ , donde  $\gamma$  es la razón giromagnética del electrón ( $\gamma = 1,76 \times 10^7 [Oe^{-1}s^{-1}]$ ),  $\Delta$  es el ancho de la pared de dominio y  $\alpha$  es la constante de amortiguamiento del espín. En el marco móvil de una pared de dominio transversal, la configuración de espín estacionaria se escribe por un ángulo de inclinación  $\psi$  que caracteriza la dirección vectorial fuera del plano del espín dentro de la pared de dominio (inserto en Fig. 1.7).

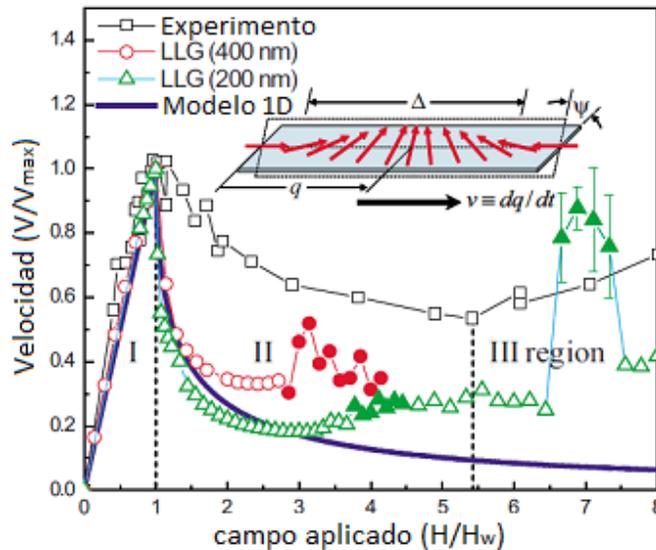


Figura 1.7: Velocidad de propagación de la pared de dominio normalizada a  $v_{max} = v(H_w)$  como función del campo aplicado normalizado al campo de Walker  $H_w$ .

Las regiones II y III en la curva de movilidad, ambas sobre el quiebre de Walker, se caracterizan porque el valor estacionario de  $\psi$  se reemplaza por un movimiento de precesión

<sup>3</sup>micromagnetics se tradujo como micromagnetismo.

<sup>4</sup>El concepto de caída de Walker ha sido bien explicado en la referencia [Hubert and Schäfer, 1998]

$d\psi/dt \neq 0$ . La región II se caracteriza porque la movilidad es una diferencial no lineal y negativa ( $dv/dH < 0$ ), mientras que la región III presenta una movilidad lineal y positiva, similar al comportamiento observado para la región I, pero con un valor significativamente menor.

Para trabajar en la región I, la intensidad del campo magnético debe ser pequeña comparada con el campo de Walker,  $H_w$ , ya que la velocidad de la pared de dominio es una función aproximadamente lineal del campo aplicado (ver Fig. 1.7). Para modelar el comportamiento dinámico de esta región, considerando la propagación de una pared de dominio en un material real, usaremos el modelo del oscilador armónico lineal en un medio viscoso excitado por una fuerza dependiente del tiempo,  $F(t)$  [Chen, 2013]. Según Chen la propagación se puede escribir de la siguiente forma:

$$m_{dw} \frac{d^2x}{dt^2} + \beta \frac{dx}{dt} + \alpha x = F(t), \quad (1.4)$$

donde  $m_{dw}$  es la masa efectiva de la pared por unidad de área,  $\beta$  es el amortiguamiento que caracteriza la viscosidad del medio,  $\alpha$  es la constante de suavidad y  $x$  es el desplazamiento de la pared desde la posición de equilibrio. En el caso de una pared de dominio,  $F(t)$  representa la fuerza que actúa sobre la pared de dominio debido al campo externo  $H$ , y está dada por:

$$F(t) = b\mu_0 M_s H, \quad (1.5)$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad del vacío,  $M_s$  es la magnetización de saturación, y  $b$  es una constante que depende de la configuración de la pared de dominio: 2 para una pared de  $180^\circ$  y  $\sqrt{2}$  para una pared de  $90^\circ$ . Como mencionamos anteriormente, la región I considera campos magnéticos pequeños con respecto del campo crítico ( $H_w$ ), y como la propagación de la pared se realiza a velocidad constante (ver Fig. 1.7), entonces se puede desprender que ( $d^2x/dt^2 \rightarrow 0$ ), por lo que la velocidad de propagación de la pared de dominio se puede escribir como [Chen, 2013]:

$$v = S (H - H_p), \quad (1.6)$$

donde  $S$  es la movilidad de la pared y  $H_p$  es un campo magnético pequeño que permite liberar a la pared de dominio de puntos de nucleación o imperfecciones dentro del material. Es importante señalar que por debajo de este valor de campo no se observa experimentalmente el movimiento de paredes de dominio. Si reemplazamos la Ec. 1.6 en la Ec. 1.4 obtenemos que:

$$S = \frac{b\mu_0 M_s}{\beta}, \quad (1.7)$$

$$H_0 = \frac{\alpha x}{b\mu_0 M_s}. \quad (1.8)$$

Se puede apreciar que la movilidad es inversamente proporcional al coeficiente de atenuación. Respecto del campo, no existe consenso, ya que algunos autores lo consideran

simplemente como la coercividad [O'Dell, 1981], mientras que otros lo llaman coercividad dinámica [hub, ], ya que difiere del valor obtenido a partir de curvas de histéresis. Los valores típicos de la movilidad están entre  $S = 1 - 1000 [ms^{-1}mT^{-1}]$ , mientras que experimentalmente se han registrado velocidades que superan los  $10 [Km/s]$ .

### 1.3.2. Propagación de paredes mediante corrientes polarizadas en espín

Una corriente eléctrica es el transporte de cargas eléctricas a través de un conductor. Comúnmente los portadores de carga son electrones, no obstante, el electrón además de tener carga, tiene masa y espín.

Existen mecanismos que permiten controlar el espín de un electrón, como por ejemplo, un campo magnético o la resistencia eléctrica de un material, que permiten modificar la orientación de éste y lograr que permanezca en ese mismo estado por tiempos prolongados. Un flujo de portadores de carga (electrones) donde todos tengan el mismo estado de espín se denomina corriente polarizada en espín. Por consiguiente, la electrónica convencional obtiene un grado de libertad adicional ya que no sólo se transporta carga eléctrica sino que también se pueden transportar espines.

Anteriormente se discutió la motivación detrás de controlar el desplazamiento de paredes de dominio, que era su uso en memorias tipo pistas de carrera. También se habló que empleando campos magnéticos es posible desplazar una pared de dominio. En general, aplicar un campo magnético produce que los dominios paralelos a la dirección del campo crezcan, de modo que un dominio antiparalelo al campo aplicado desaparece y eventualmente se perdería información.

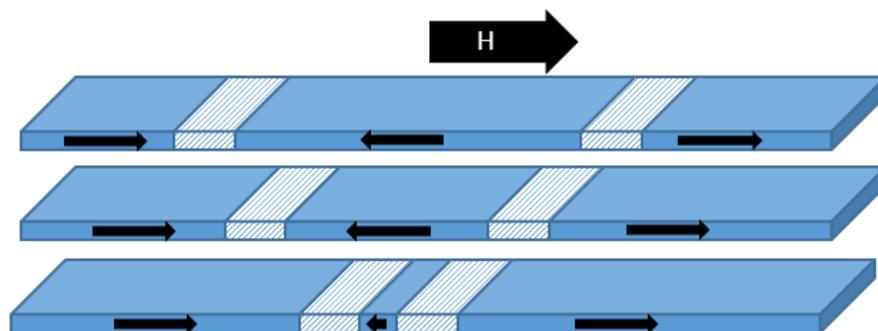


Figura 1.8: Evolución de una memoria tipo pista de carrera si se utilizará un campo magnético como motor para el movimiento de paredes de dominio.

Por otra parte, cuando una corriente polarizada en espín atraviesa una pared de dominio transfiere el momento angular de espín de la corriente a la magnetización, induciendo así un torque sobre la pared de dominio que conduce al movimiento de la misma. En particular, si hay dos o más paredes de dominio adyacentes dentro de un sustrato, al aplicar una corriente polarizada en espín, todas se moverán en la misma dirección, por lo que el movimiento de paredes de dominio inducido por corriente polarizada en espín es el ingrediente esencial de una memoria tipo pista de carrera.

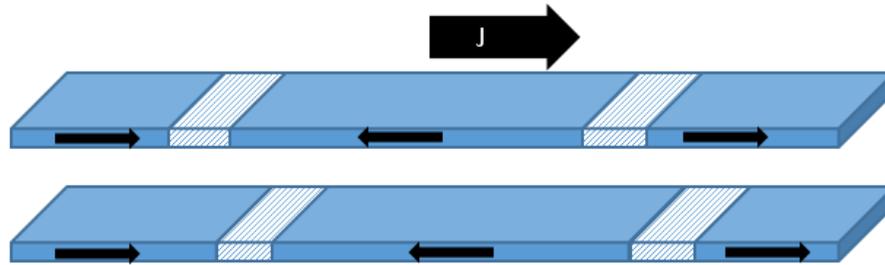


Figura 1.9: Evolución de una memoria tipo pista de carrera si se utilizará una corriente polarizada en espín como motor para el movimiento de paredes de dominio.

En una memoria tipo pista de carrera, los datos se almacenarán en una secuencia de dominios a lo largo de una nanoestructura, donde los bits individuales se deben almacenar y recuperar moviendo dicha secuencia. De este modo, una memoria de pista utiliza corrientes eléctricas polarizadas en espín para mover paredes de dominio sin desplazar átomos. Por otra parte, el espacio entre las paredes de dominio (longitud de bit) se controla mediante sitios de anclaje dispuestos a lo largo de la pista. Existen diferentes métodos para crear tales sitios de fijación, por ejemplo, mediante ranuras en los bordes de la pista, modulando el tamaño de la pista o cambiando las propiedades del material.

### 1.3.3. Nucleación, propagación y control de paredes de dominio

Se entenderá por nucleación de una pared de dominio al lugar físico donde ésta aparece en la muestra, para posteriormente propagarse dando origen a la reversión de la magnetización. Al calcular las energías involucradas en el proceso de nucleación y propagación de una pared de dominio obtenemos el siguiente resultado:

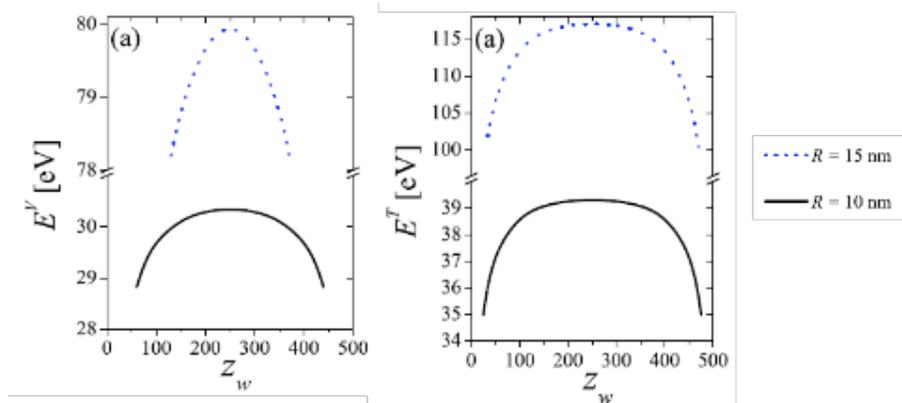


Figura 1.10: Energía de una pared de dominio tipo vórtice (izquierda) y transversal (derecha) como función de la posición de la pared dentro de un tubo con diferentes radios.

A partir de los gráficos anteriores se puede desprender que, independientemente del tipo de pared de dominio, éstas se originarán (nuclearán) en las tapas del tubo debido a que esta sección exhibe una menor energía.

Antes de poder usar las paredes de dominio como soporte para almacenar información, o en aplicaciones fotovoltaicas [Yang et al., 2010], es necesario estudiar su movimiento en detalle para posteriormente lograr controlarlas. A priori, uno podría predecir dónde una pared nucleará (en las tapas o en cualquier otro defecto estructural), sin embargo, son necesarios más estudios para lograr aumentar su velocidad de propagación, o frenarlas, si es necesario. Lewis [Lewis et al., 2010] encontraron experimentalmente que al agregar trampas en forma de cruz a una cinta magnética, la velocidad de desplazamiento de la pared aumenta. Es más, al disminuir la distancia entre las trampas la velocidad se incrementa aún más.

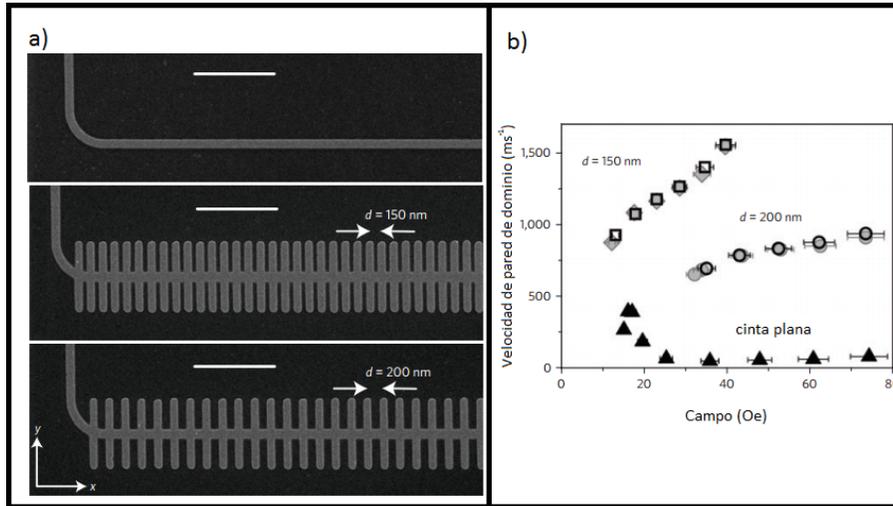


Figura 1.11: a) Imagen SEM de tres cintas de Permalloy: la primera es lisa, la segunda tiene trampas y la tercera tiene trampas más separadas. b) Velocidad de propagación de la pared de dominio como función del campo magnético aplicado para cada cinta.

Por otro lado, para detener una pared de dominio, Escrig [Salazar-Aravena et al., 2013] han descubierto que una nanoestructura cilíndrica multisegmentada, que alterna segmentos de nanohilos y nanotubos de manera sucesiva, es capaz de detener una pared de dominio tipo vórtice, la que queda atrapada en la zona de transición entre ambos segmentos hasta que el campo magnético externo alcanza una intensidad tal, que es capaz de liberar la pared.

Finalmente, usando electrodeposición pulsada es posible sintetizar nanohilos y nanotubos cuyo diámetro presenta modulaciones [Salem et al., 2013, Minguez-Bacho et al., 2014].

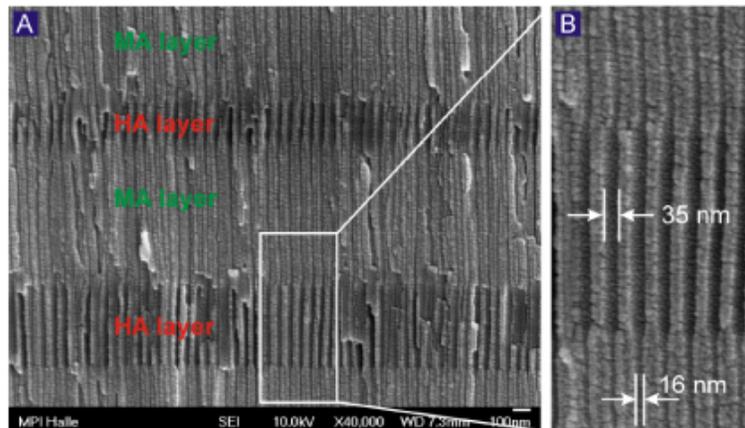


Figura 1.12: Imagen SEM de un arreglo de nanohilos modulados.

### 1.3.4. Aplicaciones de las paredes de dominio

Las paredes de dominio magnéticas han sido propuestas como soporte para almacenar información en computadoras o como circuitos que desempeñen la función de puertas lógicas.

#### 1.3.4.1. Almacenamiento de información

Como se mencionó anteriormente, el principal uso que se le da a los materiales ferromagnéticos dice relación con las tecnologías de la información. Los discos duros están compuestos por diferentes zonas magnetizadas en el plano. Cuando cierta sección del disco pasa a través de un cabezal de lectura, la transición entre una dirección de magnetización y otra induce una corriente en el lector que es interpretada como información.

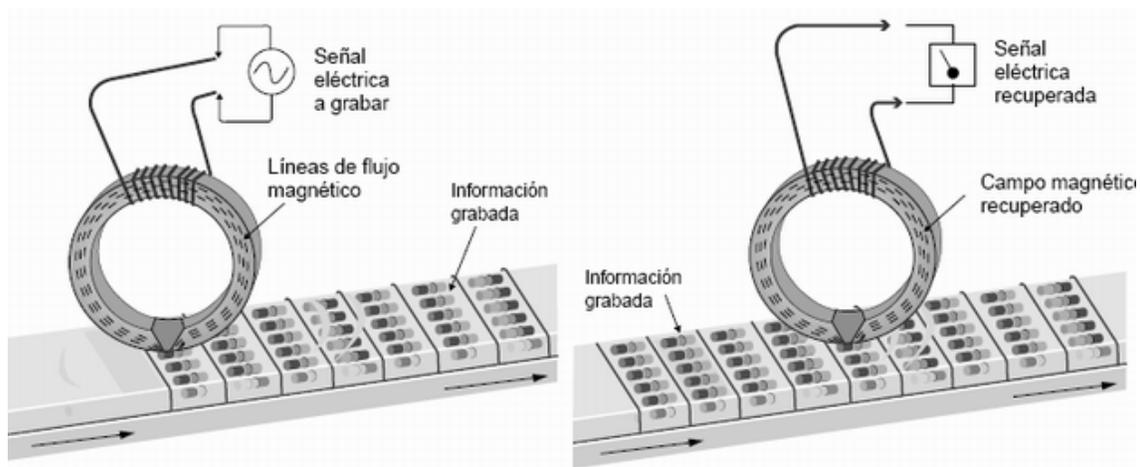


Figura 1.13: La información que está fija en el disco avanza bajo el cabezal, mientras que la corriente inducida sobre éste pasa a ser interpretada como información.

#### 1.3.4.2. Memoria magnética tipo pista de carrera (racetrack memory).

Como ya se mencionó anteriormente, el hecho de que las paredes de dominio magnéticas tengan la capacidad de desplazarse con un campo magnético externo, motivó a Parkin [Parkin et al., 2008] a idear un tipo diferente de memoria magnética, donde el sustrato esté fijo mientras que lo que se desplaza sea la pared de dominio. Sin embargo, en este sistema, en lugar de usar campos magnéticos para desplazar las paredes de dominio, se utilizan corrientes polarizadas en espín. Esto se debe a que cuando se aplica un campo magnético externo, las paredes se desplazan haciendo crecer los dominios que son paralelos al campo, haciendo desaparecer entonces los dominios antiparalelos, lo que provoca el choque de dos paredes de dominio con la consecuente pérdida de información. Por otro lado, al usar una corriente polarizada en espín, todas las paredes de dominio avanzan en la misma dirección.

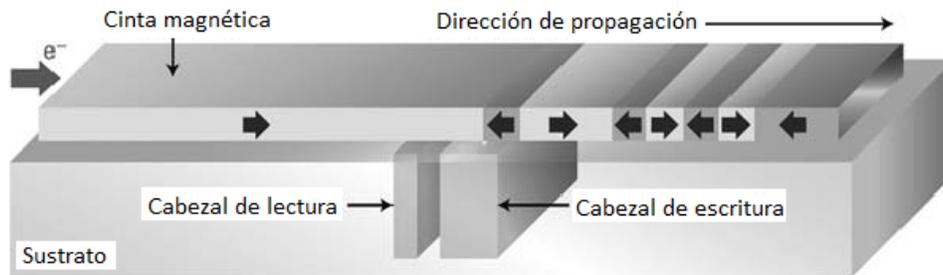


Figura 1.14: Esquema de memoria tipo pista de carrera. Debajo de la cinta se encuentran el cabezal de lectura y de escritura. Además, una corriente polarizada en espín (simbolizada por  $e^-$  desplaza las paredes de dominio para poder leer la información.

En el año 2008 se logró fabricar un dispositivo que funcionaba en base a este principio [Parkin et al., 2008], un sistema conformado por un conjunto de tres bits, que desafortunadamente tuvo dos limitaciones:

- La discrepancia entre teoría y experimento, puesto que la corriente necesaria para producir el funcionamiento del dispositivo fue mayor que la predicha teóricamente.
- El desempeño del sistema, puesto que fue similar al de un disco duro convencional.

#### 1.3.4.3. Funciones lógicas

La microelectrónica convencional ha usado circuitos integrados, específicamente circuitos de la familia CMOS, los cuales a base de transistores controlan el flujo electrónico. La mayoría de los circuitos integrados funcionan como puertas lógicas y relacionado con esto, Cowburn [Allwood et al., 2005] han demostrado experimentalmente, mediante técnicas litográficas, que es posible obtener dispositivos magnéticos que tengan el mismo comportamiento que los circuitos integrados.

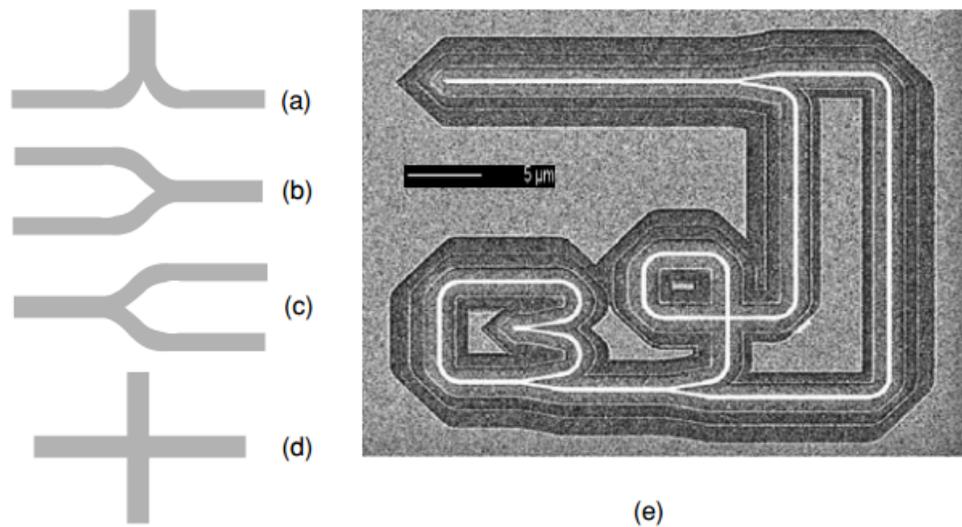


Figura 1.15: a) Operación de negación, b) puerta AND, c) salida de una puerta, d) entrecruzamiento y e) circuito demostrativo, donde se mezclan algunas de las operaciones mostradas anteriormente.

### 1.3.5. Paredes de dominio en estructuras cilíndricas

Mediante simulaciones y cálculos analíticos, Landeros [Landeros et al., 2007] demostraron que los principales modos de reversión para una nanoestructura cilíndrica son la rotación coherente (C), la nucleación y propagación de una pared de dominio tipo vórtice (V) o la nucleación y propagación de una pared de dominio tipo transversal (T). Además, ellos demostraron que la rotación coherente sólo existe para nanoestructuras con longitudes pequeñas.

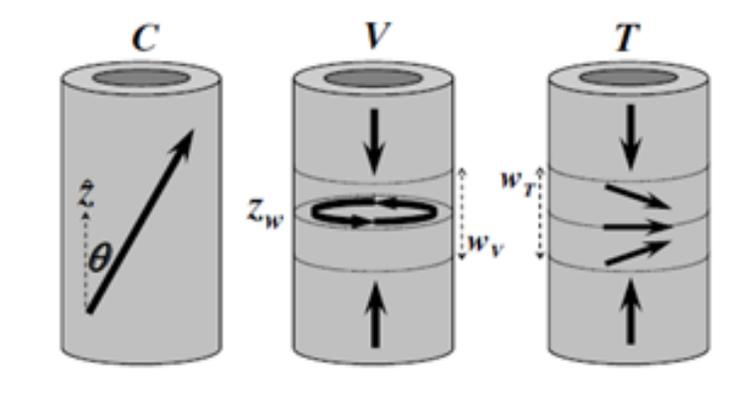


Figura 1.16: Esquema de los modos de inversión en nanoestructuras cilíndricas.

## 1.4. Interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas

Arreglos de partículas magnéticas cilíndricas tales como cilindros, hilos y tubos con un ordenamiento geométrico particular, han sido intensamente investigados durante las últimas dos décadas. Tales estructuras se pueden adaptar para mostrar diferentes estados magnéticos estables, dependiendo de sus detalles geométricos. Además del interés científico en las propiedades magnéticas de estos sistemas, existe evidencia de que éstos podrían ser usados en la producción de nuevos dispositivos magnéticos o como medios de grabación magnética de alta densidad. Diferentes técnicas litográficas pueden ser usadas para hacer crecer grandes arreglos de estos elementos. La idea de usar patrones litográficos para hacer crecer arreglos de nanoestructuras fue originalmente propuesta por Lambert [Lambert et al., 1991] en 1991 para mejorar la sensibilidad del cabezal y la razón señal/ruido. Algunos años después se comprobó que los medios litográficos ofrecen la posibilidad de incrementar las densidades superficiales. Un medio impreso consiste en una matriz de elementos discretos en el rango de los nanómetros [Chou, 1997, García-Otero et al., 2000]. Su comportamiento magnético engloba las características magnéticas de las partículas individuales como también la intensidad de las interacciones magnetostáticas entre los elementos. Por otro lado, se han utilizado métodos basados en plantillas químicas combinadas con técnicas de deposición electroquímica de alto rendimiento para preparar grandes arreglos de elementos magnéticos.

Una de las geometrías más investigada son los hilos y los tubos, donde los electrones están confinados en un potencial casi unidimensional exhibiendo un comportamiento interesante. Aunque un arreglo compuesto por unos pocos nanohilos o nanotubos ferromagnéticos podría, en principio, parecer un problema bastante simple para estudiar y modelar,

es sorprendente darse cuenta de lo complejo que puede llegar a ser. Los efectos de la interacción entre partículas son, en general, complicados por el hecho que el campo dipolar depende del estado de magnetización de cada elemento, que a su vez depende del campo producido por los elementos adyacentes. Por lo tanto, investigar arreglos interactuantes de partículas requiere generalmente fuertes simplificaciones. Como ejemplo, un modelo de Ising clásico unidimensional modificado [Sampaio et al., 2000] ha sido usado para modelar partículas cilíndricas. Esta aproximación es aceptable cuando los elementos están separados unos de otros. También, Zhan [Zhan et al., 2005] usaron la aproximación dipolar incluyendo términos adicionales como una corrección en la longitud. Velázquez y Vázquez [Vel, ] consideraron cada hilo como un dipolo, de modo que el campo axial generado por un hilo es proporcional a su magnetización. Sin embargo, este modelo es meramente fenomenológico ya que la comparación de resultados experimentales con un modelo estrictamente dipolar muestra que la interacción en el caso real es más intensa. También calcularon el campo magnetostático y lo expandieron en términos multipolares [Velázquez et al., 2003], mostrando que las contribuciones no dipolares del campo no son despreciables para las distancias consideradas en experimentos. Además, la interacción magnetostática entre elementos de varias formas fue calculado por Beleggia [Beleggia et al., 2004] empleando una expansión en el espacio Fourier.

Por otro lado, se ha desarrollado un modelo analítico para la interacción magnetostática de largo alcance entre dos hilos [Pereira et al., 2009] y tubos [Escrig et al., 2008] uniformemente magnetizados. Estos resultados permiten investigar la interacción magnetostática entre nanoestructuras magnéticas tipo código de barras que consisten en capas ferromagnéticas y no magnéticas alternadamente dispuestas en una estructura tubular [Leighton et al., 2009]. Las expresiones previamente obtenidas consideran sólo interacciones entre elementos idénticos.

## 1.5. Estructura de la tesis

La motivación general de esta tesis es entregar una visión general sobre la interacción magnetostática en nanoestructuras cilíndricas. Particularmente, se investigarán algunas formas para controlarla, ya sea modificando el tamaño o la forma de la nanoestructura. Además se investigará cómo la interacción magnetostática afecta las paredes de dominio. Para llevar a cabo este trabajo, usaremos la aproximación semiclásica introducida por Brown [Brown, 1963]. La idea es obtener ecuaciones analíticas para la energía de interacción dipolar entre sistemas magnéticos con simetría axial. La tesis está organizada de la siguiente manera:

- En el Capítulo 2 se introducirán los principios básicos de la teoría utilizada para el cálculo de las energías involucradas. Además, se realizará una pequeña revisión de la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) utilizada en los diversos programas de

cálculo: OOMMF, MAGPAR, GPMAGNET, etc. Con respecto a OOMMF, el autor de esta tesis tiene experiencia usando este programa [Palma et al., 2012].

- En el Capítulo 3 se estudiará la energía de interacción entre nanoestructuras cilíndricas de diámetro constante, como función de la geometría y la distancia que las separa. Además, en base a la ecuación obtenida se investigará si es posible encapsular partículas magnéticas sólo debido a una interacción magnetostática. Los resultados de este capítulo están publicados en [Morales-Concha et al., 2012]
- En el Capítulo 4 se realizará una extensión al análisis del capítulo 3 con el fin de calcular la energía de interacción en sistemas cilíndricos con diámetro modulado.
- En el Capítulo 5 se analizará el comportamiento de los sistemas bifásicos. La idea es calcular la interacción magnetostática entre las dos fases que componen el sistema bifásico considerando que uno de ellos está revirtiendo su magnetización.
- Finalmente se presentarán las Conclusiones Generales de esta tesis.

# Capítulo 2

## Micromagnetismo

Esta tesis está enfocada en el estudio de la interacción magnetostática entre materiales ferromagnéticos, los que exhiben una magnetización espontánea bajo la temperatura crítica. Comenzaremos definiendo las ecuaciones de Maxwell para el campo magnético,

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1)$$

donde  $\vec{B}$  es el campo de inducción magnético,  $\vec{H}$  es el campo magnético,  $\vec{J}$  es la densidad volumétrica de corriente y  $c$  es la velocidad de la luz. En general investigaremos sistemas en ausencia de corriente eléctrica, por lo que  $\vec{J} = 0$ .

### 2.1. Aproximación al continuo

En esta tesis usaremos micromagnetismo para estudiar los materiales ferromagnéticos. Esta teoría considera los materiales como un continuo, ignorando los detalles microscópicos de la estructura atómica del material [Brown, 1963]. Para poder hacer esta aproximación, la orientación de los momentos magnéticos debe variar en forma suave de un sitio de red a otro, de manera que no se observen transiciones abruptas y, por ende, la magnetización pueda ser escrita como una función bien definida en toda la nanoestructura.

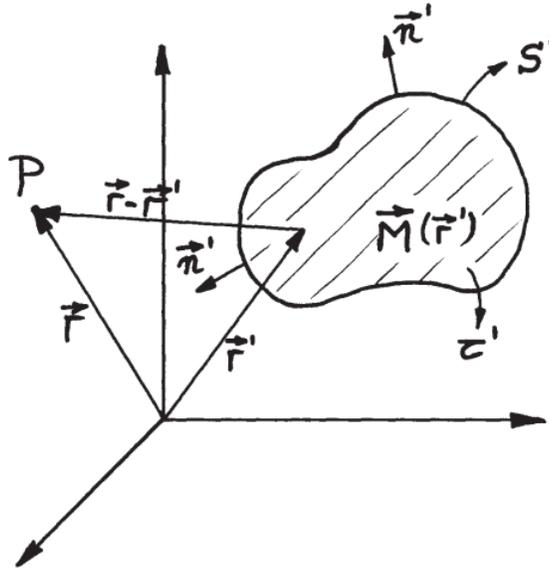


Figura 2.1: Representación esquemática del sistema.  $\vec{r}'$  representa un punto dentro del material,  $S'$  es la superficie del material y  $\tau'$  es su volumen.

Dado que la magnetización es una función continua, entonces podemos afirmar que si tengo una unidad infinitesimal de volumen  $d\tau'$  situada en el punto  $\vec{r}'$ , la cantidad  $\vec{M}(\vec{r}')d\tau'$  representa el momento magnético neto de ese elemento de volumen. Otra de las suposiciones básicas es que el módulo la magnetización debe ser constante  $|\vec{M}| = \text{cte}$ , esto quiere decir que la magnetización se puede escribir de la siguiente forma:

$$\vec{M} = M_0 (m_x \hat{i} + m_y \hat{j} + m_z \hat{k}) \quad (2.2)$$

donde  $M_0$  es la magnetización de saturación,  $m_i$  es la magnetización reducida, y donde el conjunto de todas ellas debe cumplir la siguiente condición:

$$\sum_{i=1}^3 m_i^2 = 1. \quad (2.3)$$

## 2.2. Energías involucradas

La orientación de los momentos magnéticos dentro de un material ferromagnético estará determina por las energías involucradas. De esta forma, para poder describir la magnetización de un material ferromagnético, debemos ser capaces de calcular las energías en la aproximación del continuo. Las energías principales que afectan a los materiales ferromagnéticos son:

- **Energía de Zeeman**, es la interacción existente entre los momentos magnéticos y un campo magnético externo.
- **Energía de Intercambio**, que surge del traslape de las funciones de onda de los electrones vecinos dentro del material.
- **Energía de Anisotropía**, definida por la simetría cristalina del material.
- **Energía Magnetostática**, definida como la interacción entre la magnetización y el campo (demagnetizante) que produce  $\vec{M}$ .
- **Energía Magnetoelástica**, que tiene relación con el estrés mecánico al que puede estar sometida la muestra. Generalmente está asociada a los procesos de síntesis o fabricación, aunque también de manera intencionada puede aplicarse un esfuerzo mecánico a las muestras.

### 2.2.1. Energía de Zeeman

El momento magnético de los átomos se define como:

$$\vec{\mu}_m = \mu_B g \vec{S}, \quad (2.4)$$

donde  $g$  el factor de Landé,  $\mu_B$  el magnetón de Bohr y  $\vec{S}$  es el momento angular total. La aplicación de un campo de inducción  $\vec{B}$  sobre un material ferromagnético, reorientará los momentos magnéticos de la muestra. Esta interacción entre un campo magnético externo y un momento magnético recibe el nombre de acoplamiento de Zeeman, y está definida de la siguiente forma:

$$e_z = -\vec{\mu}_m \cdot \vec{B}. \quad (2.5)$$

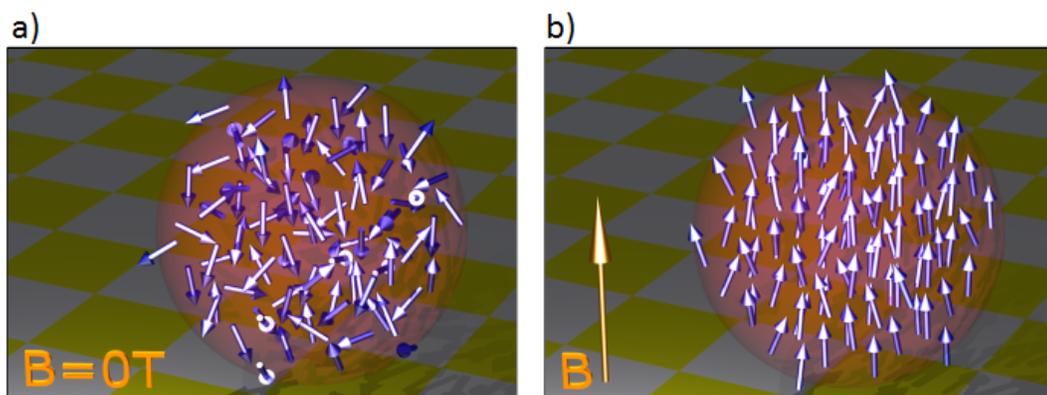


Figura 2.2: Momentos magnéticos en ausencia (a) y en presencia (b) de un campo magnético externo.

La ecuación anterior considera la contribución de un sólo momento magnético. La energía total de una muestra ferromagnética con  $N$  átomos estará dada por:

$$E_z = - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}. \quad (2.6)$$

Se puede reescribir la ecuación anterior considerando la aproximación del continuo, para lo cual debemos recordar la definición de la magnetización que está dada por:

$$\vec{M} = n\vec{\mu}_m = \frac{N}{V}\vec{\mu}_m \rightarrow \vec{\mu}_m = \frac{V}{N}\vec{M}, \quad (2.7)$$

y que  $\vec{B} = \mu_0 (\vec{M} + \vec{H})$ . A partir de estas expresiones podemos obtener una ecuación para la energía de Zeeman en el continuo:

$$E_z = -\mu_0 \int_V \vec{M} \cdot \vec{H} dV, \quad (2.8)$$

## 2.2.2. Energía de intercambio

La energía de intercambio es la razón de porque los materiales ferromagnéticos exhiben una magnetización espontánea en ausencia de campo magnético externo. Su origen se debe a la simetría que presentan las funciones de onda de un sistema respecto al intercambio de las partículas. Heisenberg [Heisenberg, 1928] presentó una expresión fenomenológica para esta interacción dada por:

$$e_{ex} = -J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j, \quad (2.9)$$

donde  $\vec{s}_i$  es el momento angular del espín localizado en el  $i$ -ésimo sitio de la red,  $J_{ij}$  es la integral de intercambio, cuyo valor puede ser calculado a partir de primeros principios, aunque en general se considera una constante obtenida a partir de experimentos. En general, se puede asumir la siguiente condición para la integral de intercambio:

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{primeros vecinos} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \begin{cases} J > 0 & \text{ferromagneticos} \\ J < 0 & \text{antiferromagneticos} \end{cases} \quad (2.10)$$

Dado que el ángulo entre espines vecinos es pequeño, se puede desarrollar el producto punto como una serie de potencias, de manera que la energía de intercambio total para un conjunto de partículas es dada por:

$$E_{ex} = E_{ex}^0 - Js^2 \sum_{n,m} \phi_{ij}^2. \quad (2.11)$$

Además, el ángulo entre espines vecinos puede ser expresado como una función de la magnetización, de modo que:

$$E_{ex} = E_{ex}^0 - Js^2 \sum_{m,n} [(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}]^2, \quad (2.12)$$

donde  $\vec{m}$  es la magnetización reducida, como habíamos definido anteriormente. Esta expresión puede ser llevada al continuo, en cuyo caso tiene la siguiente forma:

$$E_{ex} = E_{ex}^0 + A \int_V [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2], \quad (2.13)$$

donde  $A$  es la denominada constante de Stiffness, que se obtiene a través de la siguiente expresión:

$$A = \frac{Js^2c}{a}, \quad (2.14)$$

donde  $a$  es la constante de red del material y  $c$  es un valor que depende del ordenamiento cristalino del material. En particular,  $c = 1$  corresponde a una celda cúbica simple,  $c = 2$  a una celda centrada en el cuerpo,  $c = 4$  a una celda centrada en las caras y  $c = 2\sqrt{2}$  a una celda hexagonal compacta.

### 2.2.3. Energía magnetostática

La energía dipolar o magnetostática tiene su origen en las interacciones clásicas entre los dipolos magnéticos dentro de un material. Esta interacción está representada por la interacción entre la magnetización del material y el campo demagnetizante. Si el campo es producido por la misma partícula se habla de anisotropía de forma o autoenergía, mientras que si el campo es producido por otra partícula, entonces se habla de interacción magnetostática.

#### 2.2.3.1. Esfera físicamente pequeña

Se considerará una red de dipolos magnéticos localizados, donde  $\vec{\mu}_i$  es el momento magnético en el sitio  $i$ -ésimo y  $\vec{h}_i$  es la intensidad del campo demagnetizante, que se debe entender como el campo producido por todos los demás momentos magnéticos. En base a estos antecedentes se puede escribir la energía magnetostática de la siguiente forma:

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{h}_i. \quad (2.15)$$

La esfera físicamente pequeña es una aproximación que permite determinar el campo magnetostático. La idea es centrar alrededor del momento  $\vec{\mu}_i$  una esfera imaginaria. El radio de ésta debe ser mayor que el parámetro de red del material, para poder considerar

que el campo fuera de la esfera es continuo, pero a la vez tiene que ser lo suficientemente pequeño como para considerar que el campo dentro de la esfera es uniforme. De este modo, el campo demagnetizante producido por todos los momentos magnéticos vecinos estará dado por:

$$\vec{h}_i = \vec{H}_d - \vec{H}_{esf} + \vec{h}'_i, \quad (2.16)$$

donde  $\vec{H}_d$  es el campo continuo fuera de la esfera,  $\vec{H}_{esf}$  es el campo continuo producido por la esfera físicamente pequeña y  $\vec{h}'_i$  es el campo discreto dentro de la esfera. En otras palabras, al campo continuo de todo el material se le resta el campo producido por la esfera y le añade una contribución discreta que será el campo producido por los momentos dentro de la esfera.

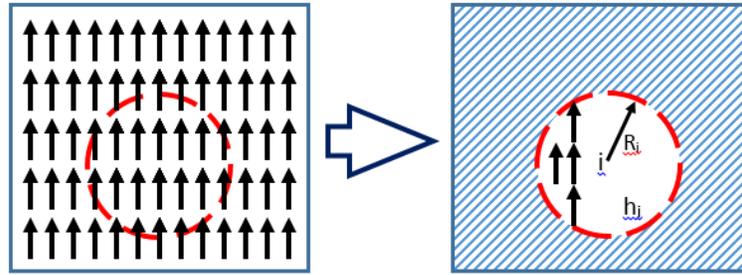


Figura 2.3: Esquema de la aproximación de la esfera físicamente pequeña. El campo fuera de la esfera es continuo mientras que el campo dentro de la esfera es discreto y uniforme.

Como el campo continuo producido por la esfera está dado por  $\vec{H}_{esf} = (-4\pi/3)\vec{M}$ , entonces la ecuación anterior queda como:

$$\vec{h}_i = \vec{H}_d - \frac{4\pi}{3}\vec{M} + \vec{h}'_i. \quad (2.17)$$

Para determinar la contribución discreta, se debe recordar que es una suma sobre campos debido a dipolos puntuales dentro de la esfera, es decir:

$$\vec{h}'_i = \frac{1}{4\pi} \sum_{|r_{ij}| < R} \left[ -\frac{\vec{\mu}_j}{|r_{ij}|^3} + \frac{3(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij})\vec{r}_{ij}}{|r_{ij}|^5} \right], \quad (2.18)$$

donde  $\vec{r}_{ij}$  es un vector que apunta desde el sitio  $i$  al sitio  $j$ . En la esfera físicamente pequeña,  $\vec{\mu}_j$  es constante y no depende de  $j$ , de manera que es posible escribir la componente  $x$  del campo en coordenadas cartesianas como:

$$\vec{h}'_{ix} = \frac{1}{4\pi} \sum_{|r_{ij}| < R} \left[ -\frac{\vec{\mu}_x}{|r_{ij}|^3} + \frac{3x_{ij}(\vec{\mu}_x x_{ij} + \vec{\mu}_y y_{ij} + \vec{\mu}_z z_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right]. \quad (2.19)$$

Si el cristal tiene simetría cúbica, entonces la suma sobre una esfera de los términos  $x_{ij}$ ,  $y_{ij}$  o  $z_{ij}$  se anulan, ya que existe igual contribución de términos positivos y negativos. Además, en una red con simetría cúbica,  $x$ ,  $y$ ,  $z$  son intercambiables, de manera que:

$$\sum \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^5} = \sum \frac{y_{ij}^2}{r_{ij}^5} = \sum \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^5} = \frac{1}{3} \sum \frac{x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + z_{ij}^2}{r_{ij}^5} = \frac{1}{3} \sum \frac{1}{r_{ij}^3}, \quad (2.20)$$

De esta forma, la suma sobre la Ec. 2.19 es cero, lo que obviamente también ocurrirá para las otras componentes de  $\vec{h}'_i$ . Es importante señalar que en una simetría diferente a la cúbica, la suma no será necesariamente cero, aunque  $\vec{\mu}_i$  podrá ser extraído de la suma y eventualmente se podría realizar la misma acción para las otras componentes del campo. En conclusión, al asumir que  $\vec{M}$  puede aproximarse por una constante dentro de la esfera,  $\vec{h}'_i$  es una función lineal de las componentes de  $\vec{M}$ , cuyas componentes dependen sólo de la simetría cristalina. En otras palabras:

$$\vec{h}'_i = \overset{\leftrightarrow}{\Lambda}_{ij} \vec{M}_j, \quad (2.21)$$

donde  $\overset{\leftrightarrow}{\Lambda}_{ij}$  es un tensor dependiente de la simetría cristalina, que para una simetría cúbica debe anularse. Substituyendo las identidades encontradas en Ec. 2.15 y reemplazando la suma por una integral, la energía magnetostática queda de la siguiente forma:

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \left( \vec{H}_d + \frac{4\pi}{3} \vec{M} + \overset{\leftrightarrow}{\Lambda} \vec{M} \right) dV. \quad (2.22)$$

Además, como  $\vec{\mu}_m = V\vec{M}/N$ , se pueden reordenar los términos para obtener el siguiente resultado:

$$E_d = \underbrace{-\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H}_d dV}_{\text{Forma}} \underbrace{-\frac{2\pi\mu_0}{3} \int_V \vec{M} \cdot \vec{M} dV}_{E_d^0} \underbrace{-\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \overset{\leftrightarrow}{\Lambda} \vec{M} dV}_{\text{Cristalinidad}}, \quad (2.23)$$

de forma que:

$$E_d = E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H}_d dV - \frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \overset{\leftrightarrow}{\Lambda} \vec{M} dV. \quad (2.24)$$

El último término de la ecuación anterior corresponde a una densidad de energía (teniendo la estructura formal de una densidad de energía de anisotropía)  $\vec{M} \overset{\leftrightarrow}{\Lambda} \vec{M}$ , por lo que si  $\overset{\leftrightarrow}{\Lambda} \neq 0$ , entonces este término puede ser incluido como una anisotropía<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Resulta conveniente hacer esto ya que las constantes de anisotropía se obtienen a partir de experimentos, que por supuesto ya consideran este efecto dentro de su contribución

Finalmente la energía dipolar o magnetostática queda expresada de la siguiente forma:

$$E_d = E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H}_d dV. \quad (2.25)$$

En este punto es importante mencionar que la esfera físicamente pequeña se supone ubicada siempre dentro del ferromagneto, lo que no ocurre para puntos de red ubicados cerca de la superficie o para láminas muy delgadas. Para corregir esto se incluye la carga superficial como parte del cálculo de la energía clásica y el resto del error puede ser considerado como una contribución dentro de la anisotropía de superficie.

### 2.2.3.2. Campo demagnetizante

Como hemos visto, la energía dipolar queda expresada como función de su campo demagnetizante,  $\vec{H}_d$ . Para poder determinar este campo, recordaremos las ecuaciones de Maxwell en ausencia de corrientes eléctricas:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0 \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0. \quad (2.26)$$

Dado que el campo magnético  $\vec{H}$  puede escribirse como  $\vec{H} = \vec{H}_a + \vec{H}_d$ , donde  $\vec{H}_a$  es un campo magnético externo aplicado y  $\vec{H}_d$  es el campo demagnetizante, entonces las ecuaciones de Maxwell en ausencia de campo magnético externo,  $\vec{H}_a = 0$ , quedan expresadas como:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{H}_d = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}, \quad (2.27)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0 \rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{H}_d = \vec{\nabla} \times (-\vec{\nabla} U). \quad (2.28)$$

Realizando una correspondencia entre estas expresiones, se puede apreciar que el campo demagnetizante es el gradiente negativo de la función denominada potencial magnetostático:

$$\vec{H}_d = -\vec{\nabla} U, \quad (2.29)$$

donde el potencial demagnetizante está dado por [Aharoni, 1996]:

$$U = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \int_S \frac{\hat{n}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS'. \quad (2.30)$$

Dado que esta tesis considera el estudio de sistemas cilíndricos, es conveniente expresar la función de Green  $1/|\vec{r} - \vec{r}'|$  en coordenadas polares  $(\rho, \varphi, z)$  como:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} \int_0^{\infty} dk J_p(k\rho) J_p(k\rho') e^{-k(z_>-z_<)}, \quad (2.31)$$

donde  $z_>$  es el mayor y  $z_<$  es el menor entre  $z$  y  $z'$ , mientras que  $J_p(x)$  es la función de Bessel de primera especie de orden  $p$ .

### 2.2.3.3. Interacción dipolar entre dos partículas

La energía de interacción permite describir cómo interactúan dos partículas imantadas. La energía dipolar de la partícula 1 tendrá una contribución debido a su propio campo demagnetizante (autoenergía dipolar) y al campo demagnetizante producido por la partícula 2 (energía de interacción).

$$E_{d1} = E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d1} dV_1 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d2} dV_1, \quad (2.32)$$

del mismo modo, la energía dipolar para la partícula 2 será:

$$E_{d2} = E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d2} dV_2 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d1} dV_2, \quad (2.33)$$

de modo que la energía total del sistema es:

$$E_{d1} = 2E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d1} dV_1 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d2} dV_2 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d2} dV_1 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d1} dV_2. \quad (2.34)$$

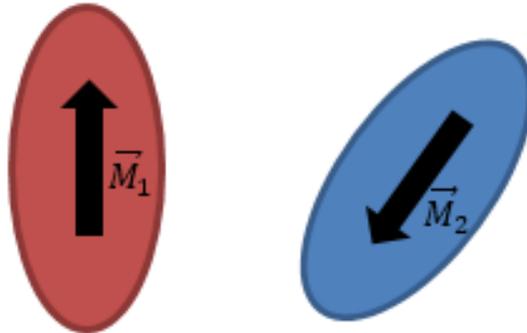


Figura 2.4: Esquema de dos partículas interactuantes.

Como se vio anteriormente, los tres primeros términos sólo involucran elementos de una sola partícula por lo que corresponderán a las autoenergías de las partícula 1 y 2, respectivamente, mientras que los dos términos restantes corresponderían a la interacción magnetostática entre ambas partículas. Según el Teorema de Reciprocidad [Aharoni, 1996], un análogo al principio de acción y reacción para sistemas magnéticos, se puede afirmar que:

$$-\frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d2} dV_1 = -\frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d1} dV_2, \quad (2.35)$$

por lo que la energía del sistema se reduce a:

$$E_{d1} = E_d^0 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d1} dV_1 - \frac{\mu_0}{2} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_{d2} dV_2 - \mu_0 \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_d dV_1, \quad (2.36)$$

y entonces el tercer término corresponde a la interacción magnetostática del sistema, dado por:

$$E_i = -\mu_0 \int_{V_1} \vec{M}_1 \cdot \vec{H}_{d2} dV_1. \quad (2.37)$$

## 2.2.4. Energía de anisotropía

La anisotropía está relacionada con la existencia de direcciones preferenciales para la orientación de la magnetización, comúnmente conocidas como ejes fáciles. La anisotropía magnetocristalina se origina debido a la interacción espín-orbita de átomos vecinos. Las órbitas electrónicas están ligadas a la red cristalina, y debido a sus interacciones, los espines prefieren alinearse en ciertas direcciones. Esta preferencia se expresa como un término energético dependiente de la dirección de la magnetización [Aharoni, 1996]. Generalmente la energía magnetocristalina es mucho menor que la energía de intercambio. De hecho, en el caso en que el material se considere policristalino, esta contribución puede ser despreciada. Sin embargo, como la energía de intercambio es isotrópica, las contribuciones que determinarán la orientación de la magnetización son la anisotropía magnetocristalina y la energía dipolar, que este caso se incorpora como una anisotropía de forma.

La energía magnetocristalina generalmente es escrita como una expresión fenomenológica expresada como una expansión en series de potencias de la dirección de la magnetización. Los coeficientes de esta expansión se obtienen a partir de ajustar resultados experimentales. Expresiones específicas pueden ser escritas sólo para ciertas simetrías cristalinas, algunas de las cuales serán explicadas a continuación.

### 2.2.4.1. Anisotropía uniaxial

La anisotropía en cristales hexagonales, como es la celda hexagonal compacta (hcp), es función de un sólo parámetro, el ángulo  $\theta$  entre el eje de la celda y la dirección de la magnetización. Experimentalmente se ha demostrado que la energía es simétrica con respecto al plano hexagonal de la red, por lo que las potencias impares de  $\cos \theta$  pueden ser eliminadas de la expansión que definirá esta energía. De este modo, los dos primeros términos quedan definidos como:

$$E_u = -K_1 \int_V \cos^2 \theta + K_2 \int_V \cos^4 \theta = -K_1 \int_V m_z^2 + K_2 \int_V m_z^4. \quad (2.38)$$

En la definición anterior el eje  $z$  es paralelo al eje de simetría de la celda. Además, los coeficientes  $K_1$  y  $K_2$  se obtienen a partir de resultados experimentales, y varían como

función de la temperatura. En principio la expansión anterior puede considerar términos de mayor orden, pero hasta el momento ningún material ferromagnético conocido lo ha requerido, y de hecho en muchos casos el segundo término es despreciable. En esta tesis se considerará la anisotropía uniaxial a primer orden, es decir:

$$E_u = -K_1 \int_V m_z^2. \quad (2.39)$$

A partir del valor de  $K_1$  se pueden considerar dos casos:

- $K_1 > 0$ . En este caso se tiene que la anisotropía uniaxial favorece los ángulos  $\theta = 0$  y  $\pi$ , por lo que el material exhibe un eje de fácil magnetización paralelo al eje de simetría del sistema.
- $K_1 < 0$ . En este caso la anisotropía uniaxial favorece el ángulo  $\theta = \pi/2$ , por lo que el material exhibe un plano de fácil magnetización perpendicular al eje de simetría del sistema.

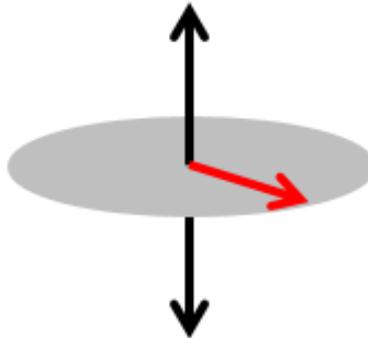


Figura 2.5: Esquema para la anisotropía uniaxial. Cuando  $K_1 > 0$  se obtiene un eje de fácil magnetización (flechas negras), mientras que cuando  $K_1 < 0$  se obtiene un plano de fácil magnetización (flecha roja).

#### 2.2.4.2. Anisotropía cúbica

Existen cristales cuya celda cristalina constituyente tiene simetría cúbica, como son la celda cúbica simple (sc), la celda cúbica centrada en el cuerpo (bcc), y la celda cúbica centrada en las caras (fcc). Por la simetría de este tipo de celdas, si se cambia  $x$  por  $y$  (u otras permutaciones equivalentes) el cristal permanece inalterable, por lo que la expansión en este caso no puede contener potencias impares. Si se define que los ejes  $x$ ,  $y$ , y  $z$  coinciden con los ejes cristalográficos, la combinación de menor orden que se ajusta a las

características mencionadas es  $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$ . Sin embargo, según la Ec. 2.3 esta cantidad es constante<sup>2</sup>. De este modo, la energía de anisotropía cúbica se puede escribir como:

$$E_a = K_1 \int_V (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) dV + K_2 \int_V m_x^2 m_y^2 m_z^2 dV, \quad (2.40)$$

donde nuevamente los valores  $K_1$  y  $K_2$  se obtienen a partir de mediciones experimentales y son dependientes de la temperatura. De igual modo, esta expansión puede realizarse hasta órdenes mayores, sin embargo, este requerimiento no ha sido necesario para ningún ferromagneto conocido. En esta tesis sólo se considerarán expansiones al menor orden, es decir:

$$E_a = K_c \int_V (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) dV, \quad (2.41)$$

donde  $K_c \equiv K_1$ . Al igual que como ocurría con la anisotropía uniaxial, existen materiales con  $K_c > 0$  y  $K_c < 0$ . Un ejemplo del primer caso es el hierro (Fe), cuyos ejes de fácil magnetización se ubican a lo largo de los ejes  $x$ ,  $y$ , y  $z$ . Por otro lado, un ejemplo del segundo caso es el Níquel (Ni), donde los ejes de fácil magnetización apuntan a lo largo de las diagonales.

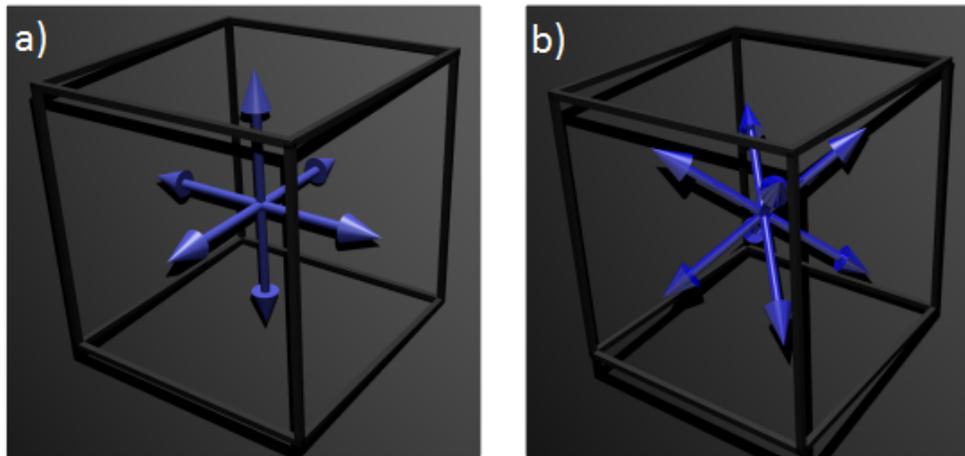


Figura 2.6: Anisotropía cúbica con  $K_c > 0$  (a) y  $K_c < 0$  (b).

### 2.2.4.3. Anisotropía ortorrómbica

En algunas ocasiones, como cuando se consideran cristales de baja simetría, tanto tetragonales como hexagonales, o en casos donde se superponen varias anisotropías uniaxiales, una anisotropía generalizada de segundo orden debe ser considerada. La densidad de energía para esta anisotropía se escribe como:

<sup>2</sup>El modulo de la magnetización siempre es constante.

$$E_{k_0} = \sum_{i,k} K_{(i,j)} m_i m_k, \quad (2.42)$$

donde  $K_{(i,j)}$  es un tensor de segundo orden. La expresión para esta energía define tres ejes ortogonales, uno fácil, uno duro y uno intermedio. En un sistema de coordenadas, que está orientado a lo largo de los vectores propios de  $K_{(i,j)}$ , la anisotropía ortorrómbica se reduce a:

$$E_{k_0} = K_1 \int_V m_x^2 + K_2 \int_V m_y^2 + K_3 \int_V m_z^2, \quad (2.43)$$

donde el  $K_i$  son los valores propios de  $K_{(i,j)}$ .

Otro ejemplo donde se puede usar la anisotropía ortorrómbica dice relación con los materiales que son sometidos a un proceso de recocido. En este caso la expresión de segundo orden será:

$$E_{k_0} = F_{ind} \int_V (a_1^2 m_1^2 + a_2^2 m_2^2 + a_3^2 m_3^2) dV + 2G_{ind} \int_V (m_1 m_2 a_1 a_2 + m_1 m_3 a_1 a_3 + m_2 m_3 a_2 a_3) dV, \quad (2.44)$$

donde  $\vec{a}$  es la dirección de fácil magnetización durante el proceso de recocido, que se genera a partir de un cambio estructural de la muestra.  $F_{ind}$  y  $G_{ind}$  son dos parámetros del material que en general dependen de la temperatura y del tiempo. La Ec. 2.44 describe una anisotropía ortorrómbica donde el eje de fácil magnetización no necesariamente coincide con el eje de recocido. En el caso particular en que  $F_{ind}$  y  $G_{ind}$  son iguales, la expresión se reduce a una anisotropía uniaxial con el eje fácil a lo largo del vector  $\vec{a}$ . Esto también es cierto para materiales policristalinos o amorfos donde, por ejemplo, películas evaporadas de Permalloy exhiben una anisotropía uniaxial.

#### 2.2.4.4. Anisotropía superficial

En la superficie de un sólido existe lo que se denomina como ruptura espontánea de la simetría. Esto se debe a que un átomo dentro del sólido, o en el bulto, tiene un conjunto completo de primeros vecinos que se puede representar por un número de coordinación aproximadamente constante, mientras que un átomo de la superficie, dependiendo de donde esté ubicado, tendrá un número de coordinación menor (ver Fig. 2.7) [Guimarães, 2009].

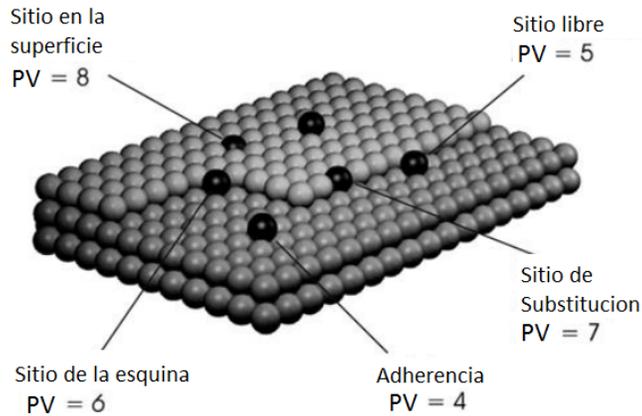


Figura 2.7: Esquema del número de coordinación que exhiben los diferentes átomos de una superficie [Guimarães, 2009].

El primero en considerar este efecto fue Néel en 1954, definiendo la anisotropía superficial de la siguiente forma:

$$E_s = \frac{1}{2} K_s \int_S (\vec{n} \cdot \vec{m}) dS, \quad (2.45)$$

donde  $\vec{n}$  es el vector normal a la superficie y  $\vec{m}$  es el vector magnetización normalizado. La integración debe ser realizada sobre toda la superficie y  $K_s$  se mide en  $J/m^2$ . Para  $K_s > 0$ , la energía es más pequeña para una magnetización orientada perpendicular a la superficie. El orden de magnitud de  $K_s$  (entre  $10^{-3}$  y  $10^{-4}$  [ $J/m^2$ ]) a menudo es más grande que el valor que se obtiene multiplicando constantes de anisotropía regulares con el espesor de una capa atómica. Esto se atribuye a la reducción de simetría del entorno atómico en la superficie. Para muestras bulto, sin embargo, los efectos de la anisotropía de superficie son insignificantes debido a que la magnetización de la superficie está acoplada al bulto mediante la interacción de intercambio. De esta forma, este término energético es importante en películas muy delgadas y sistemas multicapas. Para visualizar en detalle este efecto, vamos a cuantificar los átomos superficiales de un arreglo cuadrado de átomos como función de su tamaño.

Tabla 2.1: Proporción del número de átomos en la superficie de un cluster nanoscópico.

Número de átomos por lado	Átomos en la superficie	Total de átomos	Razón entre ambas cantidades
5	98	125	78,5
10	488	1,000	48,8
100	58,800	$1 \times 10^6$	5,9
1,000	$6 \times 10^6$	$1 \times 10^9$	0,6

A partir de tabla 2.1 se puede concluir que mientras más pequeña es la muestra, la cantidad de átomos en la superficie se vuelve más importante, lo que hace que esta anisotropía superficial, y sus efectos, se vuelvan cada vez más relevantes.

### 2.2.5. Energía magnetoelástica y magnetoestricción

Para poder caracterizar el estado energético de un ferromagneto, hasta ahora sólo se ha utilizado el vector magnetización o sus componentes reducidas. Sin embargo, cuando se consideran los efectos elásticos, aparece un nuevo grado de libertad. En particular, para un cristal cúbico, la contribución magnetoelástica está dada por:

$$E_e = B_1 \int_V \left( \alpha_1^2 \epsilon_{xx} + \alpha_2^2 \epsilon_{yy} + \alpha_3^2 \epsilon_{zz} \right) + B_2 \int_V \left( \alpha_1 \alpha_2 \epsilon_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 \epsilon_{yz} + \alpha_3 \alpha_1 \epsilon_{zx} \right), \quad (2.46)$$

donde  $B_1$  y  $B_2$  son las constantes de acoplamiento magnetoelástico. El primer término de esta contribución está asociado a la parte simétrica del tensor de distorsión, correspondientes a las deformaciones elásticas  $\epsilon_{ii}$ , mientras que el segundo término es la parte antisimétrica del tensor de distorsión, que corresponde a las rotaciones de la red  $\epsilon_{ij}$ . Los  $\alpha_i$  son los coseno directores.

Las principales contribuciones a las deformaciones elásticas son, en general, la aplicación directa de una tensión en forma externa ( $\epsilon^{ext}$ ), la tensión interna debido a los defectos estructurales ( $\epsilon^{def}$ ), la deformación espontánea por efecto magnetostrictivo ( $\epsilon^Q$ ) y finalmente las deformación elástica debido a la magnetoestricción no homogénea ( $\epsilon^i$ ):

$$\epsilon = \epsilon^{ext} + \epsilon^{def} + \epsilon^Q + \epsilon^i. \quad (2.47)$$

En general, para cristales con celda hexagonal o cristales uniaxiales el efecto magnetoelástico no es tan importante, excepto en el caso en que un fuerte campo magnético perpendicular al eje fácil provoque que la magnetización del sistema se desvíe desde este eje. Por otra parte, dentro de las paredes de dominio también existe una contribución

magnetoelástica adicional, pero por lo general es insignificante en comparación con la anisotropía uniaxial.

Por otra parte, existe una forma diferente de escribir la energía magnetoelástica, la que puede ser expresada en términos de la tensión aplicada a la muestra, en lugar de usar las deformaciones elásticas del material. Esta forma de representar la energía magnetoelástica es particularmente útil pues describe la interacción de la magnetización con las tensiones ( $\vec{\sigma}$ ) que no son de origen magnético: estrés externo o una tensión interna no magnética que puede producir dislocaciones o falta de homogeneidad en la temperatura, la estructura o la composición. Este acoplamiento es comparable a la interacción entre la magnetización y un campo magnético externo, y tiene la forma de una anisotropía ortorrómbica. Para un material isotrópico, al cual se le aplica una tensión a lo largo del eje  $\vec{a}$ , el acoplamiento magnetoelástico puede ser escrito de la siguiente forma:

$$E_e = -\frac{3}{2}\lambda_s\sigma \int_V \left[ (\vec{m} \cdot \vec{a})^2 + \frac{1}{3} \right] dV, \quad (2.48)$$

que describe una anisotropía uniaxial a lo largo de la dirección del estrés con una constante de anisotropía igual a  $K_u = \frac{3}{2}\lambda_s\sigma$ .

Asociado al efecto magnetoelástico aparece la magnetostricción, que es una propiedad de los materiales magnéticos que hace que éstos modifiquen su forma al aplicarles un campo magnético externo. A nivel microscópico, cuando un campo magnético es aplicado, las fronteras entre los dominios cambian y los dominios rotan, produciendo que cambien las dimensiones del material. En general, este efecto es medido como función de la deformación lineal relativa  $\lambda$ :

$$\lambda = \frac{\delta l}{l_0}, \quad (2.49)$$

donde  $\delta l = l - l_0$  es la variación lineal en las dimensiones del sólido. La magnetostricción de saturación,  $\lambda_s$ , que se obtiene cuando el sólido está saturado, se relaciona con la energía magnetoelástica,  $E_e$ , en el caso de un cristal de celda cúbica sometido a una tensión  $\sigma$  a través de la siguiente definición:

$$E_e = \frac{3}{2} \int_V \lambda_e \sigma \sin^2 \theta dV, \quad (2.50)$$

donde  $\theta$  es el ángulo entre la dirección de la magnetización y la dirección en que fue medida la magnetostricción.

## 2.3. Ecuación de movimiento

Las ecuaciones micromagnéticas se derivan a partir de la minimización de la energía total respecto a  $\vec{m}(\vec{r})$  utilizando el cálculo variacional. Tanto el micromagnetismo como la

teoría de dominios se basan en el mismo principio, sin embargo, la teoría de dominio subraya los aspectos globales, mientras que las ecuaciones diferenciales del micromagnetismo describen el equilibrio en cada punto.

### 2.3.1. Energía libre total

La energía libre total se obtiene al sumar todas las contribuciones, incluso aquellas que no se definieron anteriormente como son la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya, RKKY, entre otras, e integrando en el volumen de la muestra.

$$\begin{aligned}
 E_{tot} = & \underbrace{\int_V A (\vec{\nabla} \cdot \vec{m})^2 dV}_{\text{Intercambio}} + \underbrace{\int_V E_{an}(\vec{m})dV}_{\text{Anisotropia}} + \underbrace{\int_V \vec{H}_{ext} \cdot \vec{m}dV}_{\text{Zeeman}} + \\
 & + \underbrace{\int_V \vec{H}_d \cdot \vec{m}dV}_{\text{Dipolar}} + \underbrace{\int_V E_e(\sigma, \vec{m})dV}_{\text{Magnetoelstico}} + \underbrace{\int_V E_e(\hat{n} \cdot \vec{m})dV}_{\text{Superficial}}. \quad (2.51)
 \end{aligned}$$

Al minimizar la energía libre total se obtendrán los estados de equilibrio para la magnetización.

### 2.3.2. Dinámica de la magnetización

Conocer la configuración magnética de una muestra resulta muy práctico, ésta se obtiene minimizando la energía libre total. Sin embargo, cuando se quiere conocer la evolución temporal de la magnetización se requiere de una descripción dinámica de la misma. El punto de partida para construir una ecuación que describa la evolución de la magnetización es recordar que los electrones, responsables del magnetismo en átomos y moléculas, también tienen momento angular que es colineal con su momento magnético. Por lo tanto, la magnetización  $\vec{M}$  precesa en un campo magnético aplicado y el momento ejercido por este campo es  $-\gamma_e \vec{M} \times \mu_0 \vec{H}$ , donde  $\gamma_e$  es la razón giromagnética del electrón:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_e \vec{M} \times \mu_0 \vec{H}. \quad (2.52)$$

La expresión anterior describe como la magnetización,  $\vec{M}$ , precesa alrededor de la dirección del campo magnético externo,  $\vec{H}$ , manteniendo constante el ángulo que existe entre la magnetización y el campo externo. Esta descripción se aplica sólo a momentos magnéticos aislados, es decir, aquellos que no interactúan o intercambian energía con otro subsistema. Sin embargo, un conjunto de momentos magnéticos interactuantes cambiará su magnetización para relajarse a otra configuración de equilibrio, sólo si existe un mecanismo para este intercambio. En este caso, la descripción matemática correspondiente debe incluir

una amortiguación o relajación magnética. Una descripción fenomenológica que considera este amortiguamiento es la ecuación de Gilbert<sup>3</sup>:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_G \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha_G}{M_s} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}. \quad (2.53)$$

La expresión anterior contiene la variación de la magnetización con respecto al tiempo,  $d\vec{M}/dt$ , a ambos lados de la igualdad; por esta razón, Landau-Lifshitz la reescribieron de la siguiente forma:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_{LL} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha_{LL}}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}). \quad (2.54)$$

Ambas expresiones son totalmente equivalentes, de hecho es posible obtener una a partir de la otra [Brown, 1963]. Dado que ambas dan cuenta del comportamiento dinámico de la magnetización, las constantes asociadas están relacionadas de la siguiente forma:

$$\gamma_{LL} = \frac{\gamma_G}{1 + \alpha_G^2}, \quad (2.55)$$

$$\alpha_{LL} = \frac{\alpha_G \gamma_G}{1 + \alpha_G^2}. \quad (2.56)$$

De las relaciones anteriores se puede desprender que si el amortiguamiento es nulo,  $\alpha_{LL} = \alpha_G = 0$ , entonces ambas constantes giromagnéticas son equivalentes,  $\gamma_{LL} = \gamma_G$ . En ambas expresiones se emplea el término campo efectivo,  $\vec{H}_{eff}$ , el cual se define de la siguiente forma:

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{ex} + \vec{H}_a + \vec{H}_d + \vec{H}_e + \vec{H} + \dots, \quad (2.57)$$

donde  $\vec{H}$  es el campo externo aplicado,  $\vec{H}_d$  es el campo dipolar,  $\vec{H}_a$  es el campo magnético asociado a la energía de anisotropía,  $\vec{H}_{ex}$  es el campo asociado a la energía de intercambio y finalmente  $\vec{H}_e$  es el campo asociado a la energía magnetoelástica. Eventualmente, si se consideran otras interacciones, éstas deberán ser incluidas dentro de este término. Ambas expresiones, tanto la Ec. 2.53 como la 2.54, permiten obtener la evolución temporal de la magnetización. Sin embargo, resolver estas expresiones en forma analítica es complejo, ya que deben realizarse muchas simplificaciones. Una alternativa es resolver las ecuaciones anteriores como un conjunto de ecuaciones acopladas, donde cada una de ellas representa un elemento de volumen de la muestra. La solución de este problema usualmente se realiza numéricamente, para lo cual existen diferentes programas especializados.

<sup>3</sup>En este punto se debe distinguir entre William Gilbert, quien en 1600 publicó el primer estudio sobre magnetismo "De Magnete", de Thomas Gilbert, quien en 1956 en su tesis doctoral estudió los trabajos de Landau Lifschitz

### **2.3.3. Simulaciones micromagnéticas**

Como el número de elementos considerados es usualmente grande (mientras más grande el número de elementos, mejor será el ajuste entre los valores experimentales y los calculados), es prácticamente imposible resolver el conjunto de ecuaciones diferenciales en forma analítica, por lo que se requieren programas computacionales que resuelven el conjunto de ecuaciones de Landau-Lifshitz-Gilbert. Además, estos programas son capaces de registrar la magnetización de cada elemento considerado durante el proceso de simulación, permitiendo generar archivos de video donde es posible visualizar el comportamiento de la magnetización. Sin embargo, dado que hay muchos programas especializados, es importante identificar las diferencias entre ellos, y en que contextos es recomendable utilizar uno en desmedro de otro.

#### **2.3.3.1. OOMMF**

El programa OOMMF (de las iniciales Object Oriented MicroMagnetic Framework) fue desarrollado por M. J. Donahue y D. G. Porter [Donahue and Porter, 1999] en el NIST (National Institute of Standards and Technology). OOMMF emplea como método de integración las diferencias finitas (FD). Para implementar este método es necesario dividir la muestra en pequeñas regiones, proceso denominado discretización de la muestra. El programa OOMMF discretiza la muestra mediante una grilla, donde las celdas son idénticas una de otra y son paralelepípedos. Las ventajas de este programa son:

- es gratuito
- está disponible para múltiples sistemas operativos
- está en constante actualización
- permite simular el comportamiento magnético de sistemas cuando se aplica una corriente eléctrica e incluso cuando se pone en contacto con un baño térmico.
- Cuenta con el respaldo de 2228 artículos publicados en revistas ISI.

Uno de esos 2228 artículos es [Palma et al., 2012] en él se estudió el comportamiento de cantidades magnéticas como la remanencia y la coercividad de nanoanillos de Hierro asimétricos como función de las características geométricas del sistema.

#### **2.3.3.2. Magpar**

El programa Magpar fue desarrollado por Scholz, Fidler y Schrefl [Scholz et al., 2003] en la Universidad Técnica de Viena. Este programa utiliza el método de elemento finito - elemento de borde (FE/BE), que es un método híbrido que requiere que la muestra sea discretizada en elementos tetragonales, los cuales tienen forma y volumen variable. Las ventajas de este programa son:

- es gratuito.
- está disponible sólo en Linux (las versiones pre-compiladas para Windows presentan algunos problemas).
- está en constante actualización.
- permite simular sistemas que están bajo tensión externa.
- cuenta con el respaldo de 78 artículos publicados en revistas ISI.

Ambos métodos, tanto el FD como el FE/BE son comparables, pues trabajan bajo el mismo soporte de cálculo (CPU). La siguiente figura muestra una curva de histéresis de una semiesfera de 50 [nm] de diámetro obtenida a partir de ambos métodos de cálculo.

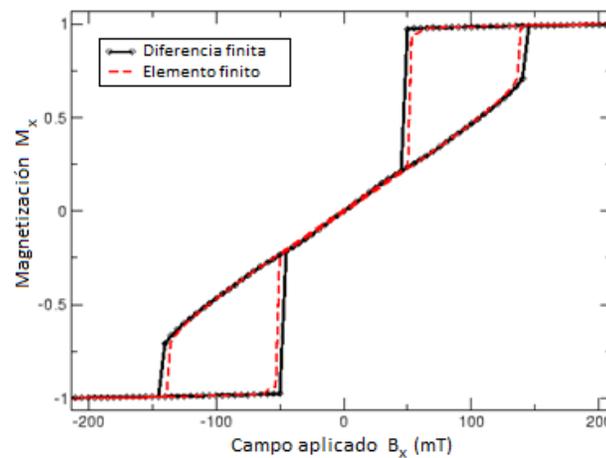


Figura 2.8: Comparación entre OOMMF y Magpar. Las diferencias entre el método de diferencia finita y elemento finito son despreciables. La ligera diferencia que se observa con el método híbrido FE/BE se debe a una ligera variación en la magnetización hacia el centro de la muestra.

### 2.3.3.3. GPMagnet

A diferencia de los programas anteriores, este es un programa pagado diseñado por la empresa GoParallel. Al igual que OOMMF, este software utiliza el método de las diferencias finitas, sin embargo, este programa aprovecha la arquitectura de las tarjetas de video para usarlas como unidad de cómputo y procesamiento de datos (trabaja en base a GPU en lugar de CPU), haciéndolo más rápido y con mayor capacidad para resolver sistemas mucho más grandes. Este programa está disponible en Windows y Linux, está en constante actualización (la última versión es capaz de calcular torque de espín e Interacción de

Dzyaloshinskii-Moriya), y una de las mayores aplicaciones que tiene este programa es que permite simular contactos eléctricos y sistemas multicapas. Para comparar el tiempo de cómputo entre el programa OOMMF y el GPMagnet, se ha simulado una placa de Níquel de  $50 \times 50 \times 1 \text{ } [\mu\text{m}^3]$ .



Figura 2.9: Tiempo que demora OOMMF y GPMagnet en avanzar un paso temporal en la simulación de una película de níquel como función del número de elementos.

# Capítulo 3

## Fuerza e interacción magnetostática entre nanoestructuras con forma cilíndrica

### 3.1. Introducción

En este capítulo se presentará una expresión general que puede ser útil para el estudio de la interacción entre partículas con forma cilíndrica pero con diferentes geometrías, como se muestra en la Fig. 3.1. Vamos a asumir que ambas partículas están paralelas, y que la dirección de sus vectores de magnetización es fija y paralela al eje de simetría de cada una de ellas. Mediante cálculos analíticos se obtienen expresiones para la interacción magnetostática de largo alcance explorando la posibilidad de variar la geometría y la posición de la partícula. Además, se ha obtenido la fuerza magnetostática entre dos nanopartículas con forma cilíndrica. Estas expresiones generales permiten la investigación de las interacciones y fuerzas magnetostáticas entre partículas cilíndricas con diferentes parámetros geométricos tales como nanoestructuras magnéticas tipo código de barra, nanohilos y nanotubos multicapas, nanoestructuras con diámetro modulado, el ordenamiento de nanoestructuras en fluidos y otros.

Los resultados mostrados en este capítulo han sido publicados en [Morales-Concha et al., 2012].

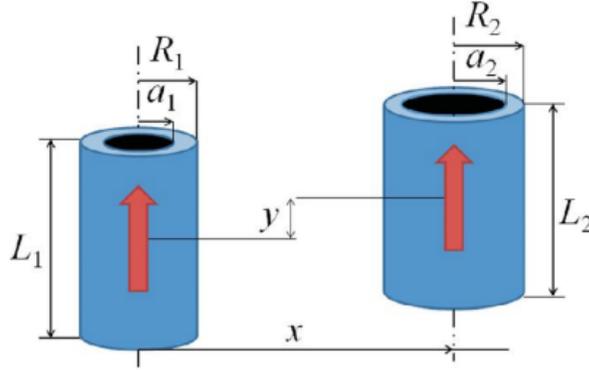


Figura 3.1: Parámetros geométricos y posición relativa de las partículas cilíndricas interactuantes.

### 3.2. Energía magnetostática

Se considerarán dos nanopartículas cilíndricas ( $i = 1$  y  $2$ ) definidas por sus radios externos e internos,  $R_i$  y  $a_i$ , respectivamente, y su longitud  $L_i$ . Se usará una versión simplificada del sistema magnético en la cual la distribución de los momentos magnéticos es reemplazada por una función continua, definida por el vector magnetización  $\vec{M}(\vec{r})$ , tal que  $\vec{M}(\vec{r})dV$  es el momento magnético total dentro de un elemento de volumen  $dV$  centrado en  $\vec{r}$ . La magnetización total puede ser escrita como  $\vec{M}(\vec{r}) = \vec{M}_1(\vec{r}) + \vec{M}_2(\vec{r})$ , donde  $\vec{M}_1(\vec{r})$  y  $\vec{M}_2(\vec{r})$  son la magnetización de la partícula 1 y 2, respectivamente, y éstas no se superponen. En este caso, el potencial magnetostático  $U(\vec{r})$  se divide en dos componentes,  $U_1(\vec{r})$  y  $U_2(\vec{r})$ , asociados a la magnetización de cada partícula. Luego, la energía magnetostática de dos partículas interactuantes se puede escribir en términos de sus magnetizaciones y los campos generados por cada una de ellas. La expresión general, después de usar el teorema de reciprocidad, es  $E_d = E_{self_1} + E_{self_2} + E_{int}$ . El término correspondiente a  $E_{self_1} = (\mu_0/2) \int \vec{M}_1(\vec{r}) \cdot \nabla U_1(\vec{r}) dV_1$  es la autoenergía de la partícula  $i$ -ésima, y  $E_{int} = \mu_0 \int \vec{M}_1(\vec{r}) \cdot \nabla U_2(\vec{r}) dV_1$  corresponde a la energía de interacción entre las partículas.

Para calcular el potencial magnetostático  $U(\vec{r})$  de una partícula aislada es necesario especificar la forma funcional de la magnetización para cada partícula cilíndrica. Como se ha supuesto que la magnetización de ambas partículas es uniforme y paralela al eje  $z$ ,  $\vec{M}(\vec{r})$  puede aproximarse por  $M_0 \hat{z}$ , donde  $M_0$  es la magnetización de saturación de cada partícula y  $\hat{z}$  es el vector unitario paralelo a la dirección del eje de la nanopartícula. Este potencial magnetostático había sido obtenido previamente [Escrig et al., 2008]. A partir de esto es posible obtener una expresión para el campo magnetostático [Leighton et al.,

2009] dada por  $\vec{H}(\vec{r}, \vec{z}) = -\nabla U(\vec{r}) = H_r(\vec{r}, \vec{z})\hat{r} + H_z(\vec{r}, \vec{z})\hat{z}$ . Finalmente, la interacción magnetostática entre dos partículas cilíndricas arbitrarias (con  $L_1 > L_2$ ) usando el campo magnetostático generado por una de las partículas está dada por:

$$E_i = -\pi\mu_0 M_0^2 R_1 R_2 L_1 \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} J_0\left(q \frac{x}{L_1}\right) \left[ J_1\left(q \frac{R_1}{L_1}\right) - \frac{a_1}{R_1} J_1\left(q \frac{a_1}{R_1}\right) \right] \times \left[ J_1\left(q \frac{R_2}{L_1}\right) - \frac{a_2}{R_2} J_1\left(q \frac{a_2}{R_2}\right) \right] e^{-\frac{q}{2}\left(1 + \frac{L_2}{L_1} + 2\frac{y}{L_1}\right)} \zeta(q), \quad (3.1)$$

donde

$$\zeta(q) = \begin{cases} (1 - e^q)(1 - e^{qL_2/L_1}), & q \geq \frac{L_1 + L_2}{2}, \\ (1 - e^q - e^{qL_2/L_1} - e^{2qy/L_1}), & q \leq \frac{L_1 + L_2}{2}, \end{cases}$$

Esta expresión general para la energía de interacción entre partículas con magnetización axial sólo puede ser resuelta numéricamente. Sus soluciones dependen de la geometría específica y del problema en cuestión, pero se pueden abordar varios sistemas, como por ejemplo sistemas cilíndricos con introducción controlada de modulaciones en su diámetro [Pitzschel et al., 2009, Pitzschel et al., 2011a] sistemas multisegmentados con segmentos de longitud variable [Leighton et al., 2009] y la encapsulación de nanopartículas magnéticas [Neumann et al., 2011]. En este punto, es importante reconocer que se han obtenido previamente expresiones para la interacción magnetostática entre nanohilos y nanotubos idénticos [Beleggia et al., 2004, Pereira et al., 2009, Escrig et al., 2008].

### 3.2.1. Aproximación para sistemas cilíndricos largos

En general, los nanohilos y los nanotubos magnéticos satisfacen la siguiente relación de aspecto  $R/L = \alpha \ll 1$ , en cuyo caso se puede usar que  $J_1(ax) \approx ax/2$ . Con esta aproximación, la Ec. 3.1 se puede escribir de la siguiente forma:

$$E_1 = -\mu_0 M_0^2 \frac{\pi R_1^2 R_2^2}{2} \left[ 1 - \frac{a_1^2}{R_1^2} \right] \left[ 1 - \frac{a_2^2}{R_2^2} \right] \left( \frac{1}{\sqrt{(L_1 + L_2 - 2y)^2 + 4x^2}} - \frac{1}{\sqrt{(L_1 - L_2 + 2y)^2 + 4x^2}} - \frac{1}{\sqrt{(-L_1 + L_2 + 2y)^2 + 4x^2}} + \frac{1}{\sqrt{(L_1 + L_2 + 2y)^2 + 4x^2}} \right) \quad (3.2)$$

### 3.3. Fuerza magnetostática

Un posible observable para la interacción entre nanopartículas cilíndricas es la fuerza de atracción entre dos nanopartículas, que puede ser obtenida como el gradiente de la energía de interacción magnetostática. Así escribimos  $\vec{F}(x, y) = -\nabla E_{int}(x, y) = F_x(x, y)\hat{i} + F_y(x, y)\hat{j}$ .

### 3.4. Resultados y discusión

Para ilustrar la utilidad de esta expresión podemos analizar el comportamiento de la energía de interacción (Fig. 3.3) y la fuerza (Fig. 3.4) entre dos nanopartículas interactuantes: un nanotubo largo de Ni con  $L_1 = 1500$  [nm],  $R_1 = 250$  [nm] y  $a_1 = 200$  [nm], y un nanohilo pequeño con  $L_2 = 500$  [nm] y  $R_2 = 100$  [nm] (ver Fig. 3.2). En los cálculos se ha utilizado  $\mu_0 M_0^2 = 3,428 \times 10^5$  [J/m<sup>3</sup>].

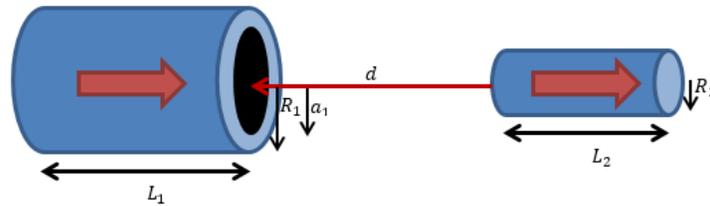


Figura 3.2: Parámetros geométricos del sistema investigado. Dado que el diámetro interno del tubo es mayor que el diámetro externo del hilo, se analizará la posibilidad de encapsular un hilo dentro de un tubo por efecto magnetostático.

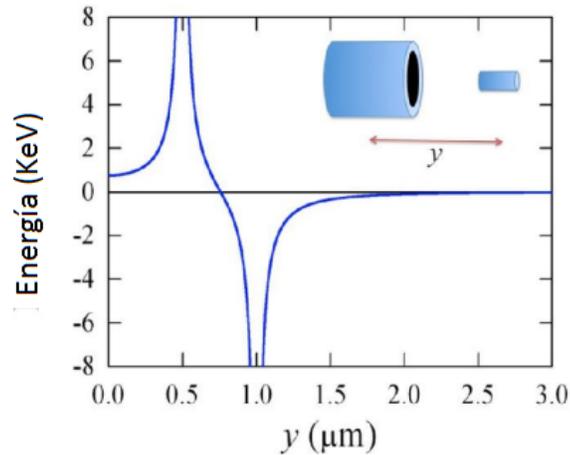


Figura 3.3: Energía de interacción de las dos nanopartículas interactuantes: un nanotubo largo de Ni con  $L_1 = 1500$  [nm],  $R_1 = 250$  [nm] y  $a_1 = 200$  [nm], y un nanohilo pequeño con  $L_2 = 500$  [nm] y  $R_2 = 100$  [nm].  $x = 0$  [nm] ha sido fijado, mientras que  $y$  puede variar.

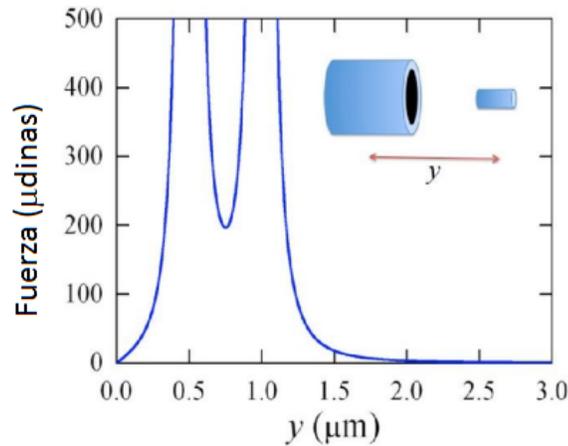


Figura 3.4: Fuerza de interacción de dos nanopartículas interactuantes: un nanotubo largo de Ni con  $L_1 = 1500$  [nm],  $R_1 = 250$  [nm] y  $a_1 = 200$  [nm], y un nanohilo pequeño con  $L_2 = 500$  [nm] y  $R_2 = 100$  [nm].  $x = 0$  [nm] ha sido fijado, mientras que  $y$  puede variar.

A partir de las Figs. 3.3 y 3.4 se observa que el nanohilo pequeño se aproxima al nanotubo debido a la fuerza de atracción magnetostática. Sin embargo, cuando  $y = 1,0$  [ $\mu\text{m}$ ], es decir, cuando ambas partículas se tocan, el nanohilo se detendrá (y permanecerá en esa posición) debido al fuerte incremento de la energía de interacción asociada a la entrada del nanohilo dentro del nanotubo. En este punto aparece entonces una fuerza repulsiva que prohíbe la entrada del hilo. Así, se puede concluir que dos elementos con magnetización axial paralela formarán cadenas para minimizar su energía de interacción [Tanase et al., 2001]. Un efecto diferente ocurre cuando la partícula más pequeña no tiene magnetización fija, es decir, cuando la dirección de magnetización es libre de rotar en un espacio tridimensional [Neumann et al., 2011]. Es importante enfatizar que en el caso en discusión, la dirección de la magnetización se mantiene fija.

### 3.5. Conclusión

En conclusión, se obtuvieron expresiones generales para la energía de interacción magnetostática entre dos nanoestructuras cilíndricas con magnetización uniforme. Se mostró un ejemplo que demostró que un elemento con magnetización axial paralela no puede ingresar dentro de otro. Debido a la fuerza de interacción el elemento más pequeño tocará al más grande y formará una cadena. La expresión general obtenida permite investigar la interacción magnetostática y las fuerzas entre partículas cilíndricas con diferentes parámetros geométricos tales como nanoestructuras magnéticas tipo código de barra, nanohilos y nanotubos multicapas, nanoestructuras con diámetro modulado, el ordenamiento de na-

noestructuras en fluidos, entre otros.

# Capítulo 4

## Interacción magnetostática entre nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado

### 4.1. Introducción

Como se habló anteriormente, uno de los posibles sistemas de almacenamiento de información que tienen por principio físico de funcionamiento propiedades magnéticas es la memoria pista de carrera. Para producir este tipo de memoria se requiere tener un sustrato que permita insertar las paredes magnéticas en su interior y algún tipo de mecanismo que permita mover o frenar las paredes de dominio, con respecto a este último el grupo de K. Nielsch [Pitzschel et al., 2011b] postula que si en lugar de usar cintas magnéticas se utilizara hilos magnéticos como sustrato para una memoria pista de carrera eventualmente puede controlar el desplazamiento de las paredes de dominio mediante modulaciones en los diámetros.

En este capítulo se presentará una expresión analítica para la interacción magnetostática entre nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado, como se muestra en la Fig. 4.1. se supondrá que ambas partículas están paralelas, y que la dirección de sus vectores de magnetización es fija y paralela al eje de simetría de cada una de ellas. Es interesante recordar que el campo magnetostático producido por una nanopartícula cilíndrica homogénea es más intenso en sus extremos. Así, en una nanoestructura con diámetro modulado, la presencia de superficies horizontales adicionales produce un aumento en la intensidad del campo magnetostático en las modulaciones. Esto implica que, aunque se espera que los tubos más delgados interactúen más débilmente con otro que un tubo más grueso, esta tendencia puede dejar de ser válida debido a la presencia de modulaciones en el diámetro: las superficies horizontales dan origen a campos magnetostáticos locales más intensos que aumentan la interacción magnetostática entre nanopartículas vecinas.

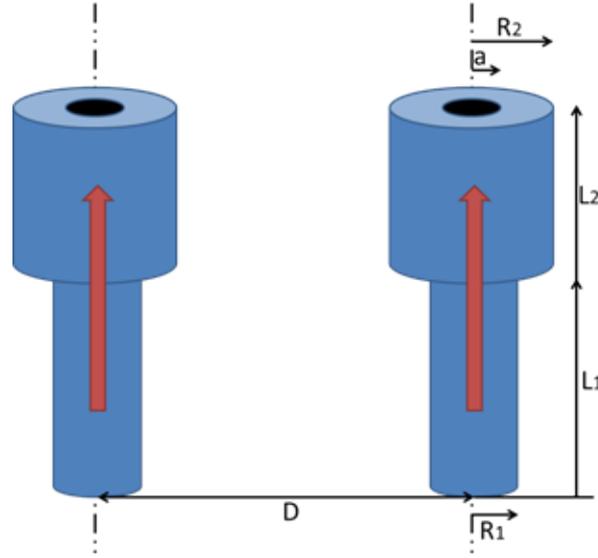


Figura 4.1: Parámetros geométricos y posición relativa de dos nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado que interactúan entre ellas.

## 4.2. Energía magnetostática

Geoméricamente, las nanoestructuras con diámetro modulado están compuestas por dos secciones. El segmento 1 tiene un radio externo  $R_1$ , un radio interno  $a$  y una longitud  $L_1$ , mientras que el segmento 2 tiene un radio externo  $R_2$ , el mismo radio interno  $a$ , y una longitud  $L_2$ . Por simplicidad se definen las siguientes razones  $\alpha = R_1/R_2$  y  $\beta = L_1/L_2$ . Es importante recordar que se considerará dos sistemas paralelos con una magnetización uniforme a lo largo de su eje. La energía de interacción magnetostática entre dos nanopartículas con diámetro modulado está dada por:

$$E_i = \frac{\mu_0 M_0^2}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{k} J_0(kd) \left[ [R_1 J_1(k\alpha R_2) - a J_1(ka)]^2 (1 - e^{-kL_1}) + [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] \right. \\ \left. [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] (e^{-k(L_1+L_2)} e^{kL_1} + e^{kL_2} - 2) - [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] \right. \\ \left. ([R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] (1 - e^{kL_1}) - [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] (1 - e^{-kL_2})) \right. \\ \left. + [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)]^2 (1 - e^{-kL_2}) \right]. \quad (4.1)$$

### 4.2.1. Aproximación para sistemas sin modulación

Para verificar el comportamiento de la función anterior, se examinará un sistema formado por dos cilindros iguales con una magnetización uniforme a lo largo de su eje. Esto

implica considerar  $R_1 = R_2$  y  $L_1 = L_2 = L/2$ . Bajo esas consideraciones, la energía de interacción resultante es:

$$E_i = 2\pi\mu_0 M_0^2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} (R J_1(kR) - a J_1(ka))^2 J_0(kd) (1 - e^{-kL}). \quad (4.2)$$

### 4.3. Resultados y discusión

Para dos nanohilos homogéneos de níquel con un radio  $R = 50$  [nm] y una longitud de  $L = 1000$  [nm], a partir de la Ec. 4.2 se obtiene el siguiente comportamiento como función de la distancia,  $d$ , existente entre ellos:

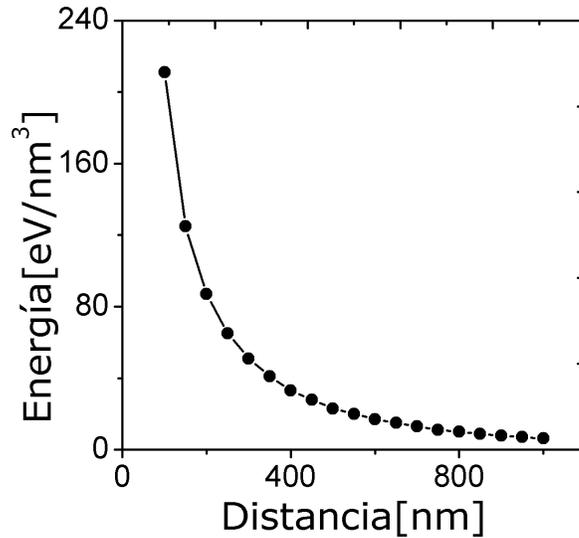


Figura 4.2: Interacción magnetostática entre dos nanohilos homogéneos de níquel con un radio  $R = 50$  [nm] y una longitud de  $L = 1000$  [nm] como función de la distancia entre ellos.

A continuación, se analizará el efecto que tiene la modulación sobre la interacción magnetostática entre estas estructuras. Para esto, se calculará la energía de interacción a partir de la Ec. B.18 como función de la distancia entre las partículas cilíndricas con diámetro modulado para distintos valores de  $\alpha = R_1/R_2$  y  $\beta = L_1/L_2$ . Vamos a considerar un sistema formado por dos nanohilos de níquel con  $R_2 = 50$  [nm] y  $L_2 = 500$  [nm]. En la Fig. 4.3a se consideraron sistemas con  $L_1 = 500$  [nm] y diferentes valores de  $\alpha$ , mientras que en la Fig. 4.3b se consideraron sistemas con  $R_1 = 25$  [nm] y diferentes valores de  $\beta$ .

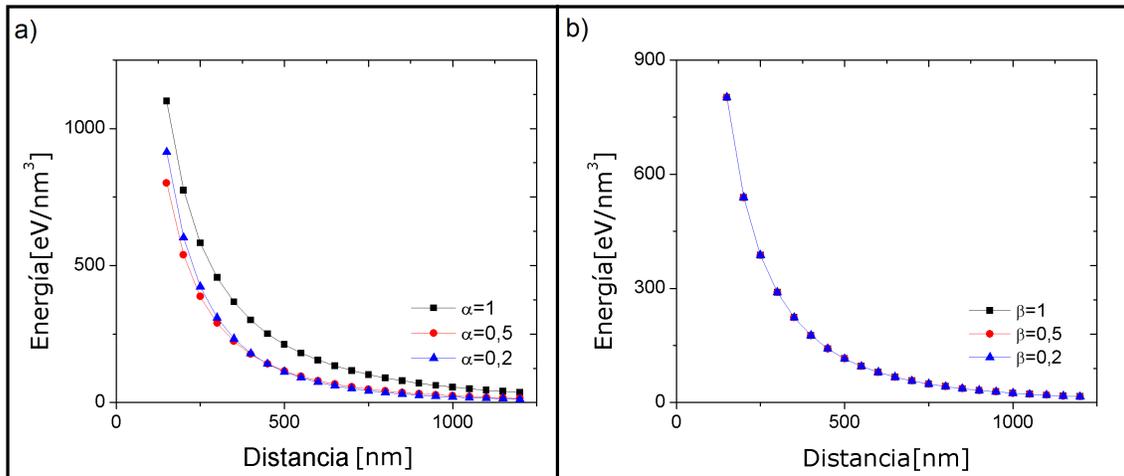


Figura 4.3: Interacción magnetostática entre dos nanopartículas cilíndricas con diámetro modulado como función de la distancia entre ellos. En a) se varió  $\alpha$  mientras que en b) se varió  $\beta$ .

Como se puede apreciar en la figura anterior, la energía de interacción disminuye a medida que aumenta la distancia de separación entre las partículas. Además, se observa que la energía de interacción depende fuertemente respecto al parámetro  $\alpha = R_1/R_2$ , pero es independiente con respecto al parámetro  $\beta = L_1/L_2$ . Esto se debe a que el campo magnetostático aumenta en aquellas superficies que son perpendiculares a la dirección de la magnetización.

#### 4.4. Conclusión

En conclusión, hemos obtenido una expresión analítica para la interacción magnetostática entre dos partículas cilíndricas con diámetro modulado. En particular, se consideró que las partículas eran paralelas entre ellas y uniformemente magnetizadas. A partir de esta expresión se puede investigar el caso particular de dos tubos homogéneos. A partir de los resultados obtenidos se concluye que la interacción magnetostática disminuye a medida que se aumenta la distancia entre las partículas, depende fuertemente de la razón entre los radios de los segmentos que componen las partículas (parámetro  $\alpha$ ) y es independiente de la longitud entre los segmentos (parámetro  $\beta$ ).

# Capítulo 5

## Interacción magnetostática entre sistemas bifásicos

### 5.1. Introducción

Uno de los principales usos que se le da actualmente a los materiales magnéticos es usarlos como medios de almacenamiento de información, la creciente demanda por discos duros de mayor capacidad de almacenaje ha llevado a investigar medios de grabación perpendiculares (los sistemas actuales funcionan en base a medios de grabación en el plano). Uno de los candidatos para reemplazar al disco duro actual y que permitiría este tipo de grabación son nanohilos o nanotubos sintetizados en membranas de alúmina porosa dado su elevado orden y que debido a su tamaño las partículas son biestables. Con el fin de incrementar más la cantidad de información que se puede almacenar en un medio perpendicular el grupo de K. Nielsch usando ALD sintetizó sistemas bifásicos [Pitzschel et al., 2012], donde al controlar el grosor del espaciador se podría tener más de dos estados dentro de la misma nanoestructura logrando así aumentar la cantidad de información a guardar.

En este capítulo de tesis se presentará una expresión analítica para la interacción magnetostática entre las dos fases magnéticas cuando una de ellas está revirtiendo su magnetización. Debido a su geometría, las fases internas y externas pueden estar lo suficientemente cerca entre ellas para interactuar mediante un acoplamiento dipolar. Esta interacción puede producir nuevos estados magnéticos de la partícula cilíndrica como un todo, que pueden ser usados para potenciales aplicaciones en espintrónica, multiferroicos, etc. Además, se puede esperar la aparición de nuevas propiedades magnéticas, como el desplazamiento magnético dipolar. La posibilidad de obtener un comportamiento similar al de una válvula de espín es muy atractivo debido a sus potenciales aplicaciones para medir campos magnéticos en sistemas de grabación magnéticos.

## 5.2. Interacción magnetostática

Geoméricamente, el sistema cilíndrico bifásico de longitud  $L$  consiste de dos tubos magnéticos separados por un espaciador no magnético. El tubo interno (externo) está caracterizado por su radio externo  $R_i$  ( $R_e$ ) e interno  $a_i$  ( $a_e$ ), como muestra la Fig. 5.1.

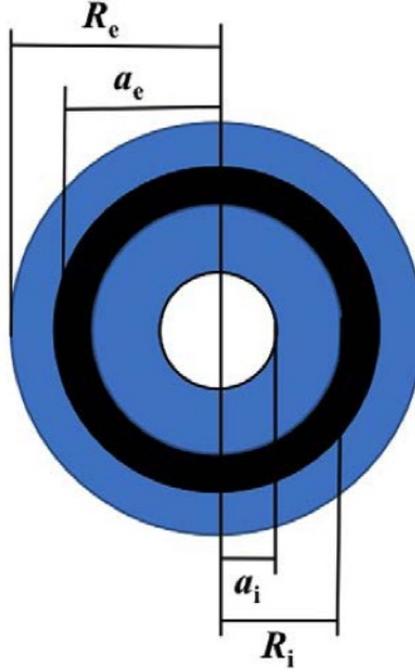


Figura 5.1: Esquema y parámetros geométricos de un sistema bifásico.

Para evaluar la interacción magnetostática entre las fases magnéticas, es necesario especificar la forma funcional de la magnetización de cada fase. Primero, se considerarán tubos con una magnetización axial definida por  $\vec{M}_\alpha = M_0 \sigma_\alpha \hat{k}$ , donde  $\hat{k}$  es el vector unitario paralelo al eje del nanotubo y  $\sigma_\alpha$  toma los valores  $\pm 1$ , permitiendo que la fase  $\alpha$  apunte hacia arriba ( $\sigma_\alpha = +1$ ) o hacia abajo ( $\sigma_\alpha = -1$ ) a lo largo de  $\hat{k}$ . Así en un sistema bifásico, la interacción magnetostática entre el tubo interno ( $i$ ) y el tubo externo ( $e$ ), cuando ambos tienen una magnetización axial, está dada por:

$$E_{int} = 2\sigma_i\sigma_e\pi\mu_0M_0^2 \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} (\Lambda_i) (\Lambda_e) (1 - e^{-kL}) \quad (5.1)$$

donde

$$\Lambda_\alpha = R_\alpha J_1(kR_\alpha) - a_\alpha J_1(ka_\alpha)$$

con  $J_p$  la función de Bessel de primera especie y orden  $p$ .

A continuación se presentará el cálculo de la interacción magnetostática entre ambas fases cuando el tubo externo está revirtiendo su magnetización mediante la propagación de una pared de dominio tipo vórtice mientras que el tubo interno permanece con una magnetización axial (ver diagrama de la Fig. 5.2). Cuando el sistema revierte su magnetización mediante la nucleación y propagación de una pared de vórtice, la magnetización dentro de la pared puede ser escrita como:

$$\vec{M} = M_0 \left( m_\phi(z) \hat{\phi} + m_z(z) \hat{k} \right) \quad , c - w/2 \leq z \leq c + w/2$$

y en las otras regiones se tiene una magnetización ferromagnética, dada por,  $\vec{M} = M_0 \hat{k}$ , (para  $0 \leq z \leq c - w/2$ ) y  $\vec{M} = -M_0 \hat{k}$ , (para  $c + w/2 \leq z \leq L$ ), donde  $w$  es el tamaño de la pared de dominio, y  $z = c$  es la posición del centro de la pared tipo vórtice, donde la magnetización yace en el plano formando un vórtice perfecto. La magnetización de esta pared de dominio puede ser modelada con la siguiente forma paramétrica,  $m_z(z) = \cos \Theta(z)$ , donde la función  $\Theta(z)$  está dada por:

$$\Theta(z) = \frac{\pi}{2} \left( \frac{z - c}{w/2} + 1 \right).$$

De esta manera, se obtiene la siguiente expresión:

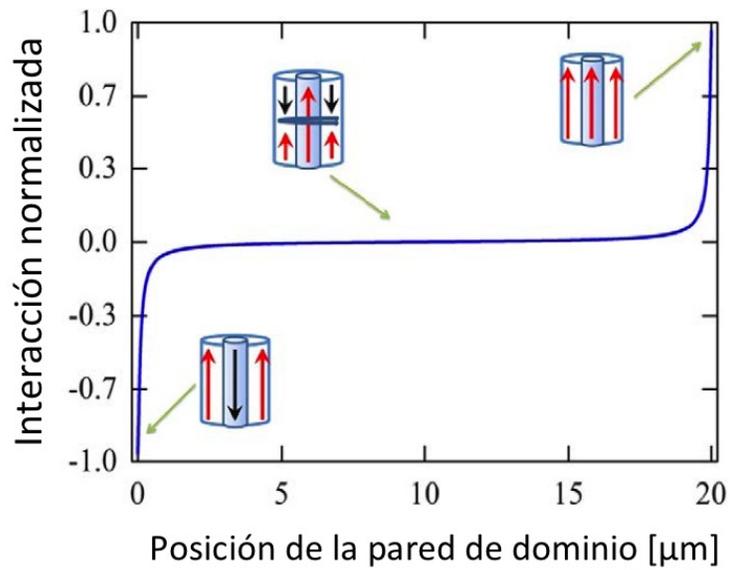
$$E_{int} = 2\pi\mu_0 M_0^2 \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} (\Lambda_i) (\Lambda_e) \Omega(k, w, c, L) \quad (5.2)$$

con

$$\Omega(k, w, c, L) = \frac{\cosh \left[ k \frac{w}{2} \right]}{1 + (kw/\pi)^2} (e^{-kL} e^{kc} - e^{-kc})$$

### 5.3. Resultados y discusión

La Fig. 5.2 ilustra la interacción magnetostática entre ambas fases magnéticas presentes en un nanotubo bifásico. Para obtener esta curva nosotros se han usado las Ecs. 5.1 y 5.2, y los siguientes parámetros geométricos: El sistema tiene una longitud  $L = 20$  [ $\mu\text{m}$ ], los radios del tubo interno son  $R_i = 65$  [nm] y  $a_i = 55$  [nm], mientras que los radios del tubo externo son  $R_e = 80$  [nm] y  $a_e = 70$  [nm]. Los resultados son casi independientes del tamaño de la pared de dominio. A partir de esta figura se observa que la magnitud más alta de la interacción magnetostática ocurre para el caso en que ambos tubos están axialmente magnetizados.



## 5.4. Conclusión

La interacción magnetostática entre ambas fases depende de las configuraciones magnéticas en cada fase y también de los parámetros geométricos considerados. Finalmente, las propiedades magnéticas únicas que exhiben los sistemas bifásicos pueden ser útiles para su uso en potenciales aplicaciones en espintrónica, en dispositivos electrónicos y magneto-plasmónicos.

# Capítulo 6

## Conclusión general

En esta tesis se ha encontrado expresiones analíticas para la interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas. En particular, se obtuvo la energía de interacción magnetostática entre dos nanoestructuras cilíndricas con parámetros geométricos arbitrarios y magnetización uniforme. Además, se dedujo una función analítica para la fuerza de interacción entre dos sistemas cilíndricos. Estas permitieron investigar el mecanismo de atracción y repulsión entre dos segmentos, concluyendo que sistemas cilíndricos uniformemente magnetizados forman cadenas.

Por otro lado, obtuvimos una expresión analítica para la interacción magnetostática entre dos partículas cilíndricas con diámetro modulado. En este caso también se consideró que las partículas eran paralelas entre ellas y uniformemente magnetizadas. A partir de la ecuación obtenida se puede concluir que la interacción magnetostática disminuye con la distancia entre las partículas, depende fuertemente de la razón entre los radios de los segmentos que componen las partículas y es independiente de la longitud entre los segmentos.

Finalmente, se investigó la interacción magnetostática entre las fases magnéticas que componen un sistema bifásico. En este caso, a diferencia de los casos anteriores, no sólo se investigó la condición en que las magnetizaciones son uniformes, sino que además se estudió el caso en que una de las fases revierte su magnetización mediante la nucleación y propagación de una pared de dominio tipo vórtice. A partir de las ecuaciones obtenidas se puede concluir que la interacción es máxima cuando ambas fases están uniformemente magnetizadas.

# Referencias Bibliográficas

- Aharoni, A. (1996). *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Oxford University Press, Oxford.
- Allwood, D. A., Xiong, G., Faulkner, C. C., Atkinson, D., Petit, D., and Cowburn, R. P. (2005). Magnetic domain-wall logic. *Science*, 309(5741):1688–1692.
- Barkhausen, H. (1919). Zwei mit hilfe der neuen verstärker entdeckte erscheinungen. *Physikalische Zeitschrift*, 20(1).
- Beleggia, M., Tandon, S., Zhu, Y., and Graef, M. D. (2004). On the magnetostatic interactions between nanoparticles of arbitrary shape. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 278:270–284.
- Bloch, F. (1932). Zur theorie des austauschproblems und der remanenzerscheinung der ferromagnetika. *Zeitschrift fur Physik*, 8(153).
- Brown, W. F. (1939). Theory of reversible magnetization in ferromagnetics. *Physical Review*, 55(568).
- Brown, W. F. (1940). Ferromagnetic domains and the magnetization curve. *Journal of Applied Physics*, 11(160).
- Brown, W. F. (1953). Magnetic energy formulas and their relation to magnetization theory. *Reviews of Modern Physics*, 25(1).
- Brown, W. F. (1959). Micromagnetics: Domain wall. *Journal of Applied Physics*, 30(4).
- Brown, W. F. (1963). *Micromagnetics*. Interscience Publishers.
- Chen, C. W. (2013). *Magnetism and Metallurgy of Soft Magnetic Materials*. Dover Publications.

- Chou, S. Y. (1997). Patterned magnetic nanostructures and quantized magnetic disks. *Proceedings of the IEEE*, 85(4):652–671.
- Donahue, M. J. and Potter, D. G. (1999). *OOMMF User's guide*. US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology.
- Escrig, J., Allende, S., Altbir, D., and Bahiana, M. (2008). Magnetostatic interactions between magnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, 93(2):023101.
- García-Otero, J., Porto, M., Rivas, J., and Bunde, A. (2000). Influence of dipolar interaction on magnetic properties of ultrafine ferromagnetic particles. *Physical Review Letters*, 84(1):167.
- Guimarães, A. P. (2009). *Principles of nanomagnetism*. Springer Science & Business Media.
- Heisenberg, W. (1928). Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49(9):619–636.
- Hubert, A. and Schäfer, R. (1998). *Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures*. Springer.
- Kalff, F. E., Rebergen, M. P., Fahrenfort, E., Girovsky, J., Toskovic, R., Lado, J. L., Fernández-Rossier, J., and Otte, A. F. (2016). A kilobyte rewritable atomic memory. *Nature Nanotechnology*, 11:926–929.
- Lambert, S. E., Sanders, I. L., Patlach, A. M., Krounbi, M. T., and Hetzler, S. R. (1991). Beyond discrete tracks: Other aspects of patterned media. *Journal of Applied Physics*, 69(8):4724–4726.
- Landau, L. D. and Lifshitz, E. (1935). On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 8(153).
- Landeros, P., Allende, S., Escrig, J., Salcedo, E., and Altbir, D. (2007). Reversal modes in magnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, 90(10):102501.
- Leighton, B., Suarez, O. J., Landeros, P., and Escrig, J. (2009). Magnetic phase diagrams of barcode-type nanostructures. *Nanotechnology*, 20(38):385703.
- Lewis, E. R., Petit, D., O'Brien, L., Fernandez-Pacheco, A., Sampaio, J., Jausovec, A.-V., Zeng, H. T., Read, D. E., and Cowburn, R. P. (2010). Fast domain wall motion in magnetic comb structures. *Nature materials*, 9(12):980–983.
- Lifshitz, E. (1944). On the magnetic structures of iron. *J. Phys. U.S.S.R.*, 8:337i;  $\frac{1}{2}$ 346.

- Minguez-Bacho, I., Rodriguez-López, S., Vázquez, M., Hernández-Vélez, M., and Nielsch, K. (2014). Electrochemical synthesis and magnetic characterization of periodically modulated Co nanowires. *Nanotechnology*, 25(14):145301.
- Moore, G. E. (2006). Cramming more components onto integrated circuits. *IEEE Solid-State Circuits Society Newsletter*, 11(5).
- Morales-Concha, C., Ossandón, M., Pereira, A., Altbir, D., and Escrig, J. (2012). General approach to the magnetostatic force and interaction between cylindrically shaped nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 111(7):07D131.
- Mott, N. F. (1936). The electrical conductivity of transition metals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 153(880):699–717.
- Néel, L. (1944). Quelques propriétés des parois de domaines élémentaires ferromagnétiques. *Cahiers de Physique*, 25.
- Neumann, R. F., Bahiana, M., Escrig, J., Allende, S., Nielsch, K., and Altbir, D. (2011). Stability of magnetic nanoparticles inside ferromagnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, 98(2):022502.
- O'Dell, T. H. (1981). *Ferromagneto dynamics: The Dynamics of Magnetic Bubbles, Domains, and Domain Walls*. Macmillan.
- Palma, J., Morales-Concha, C., Leighton, B., Altbir, D., and Escrig, J. (2012). Micromagnetic simulation of Fe asymmetric nanorings. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 324(4):637 – 641.
- Parkin, S. S. P., Hayashi, M., and Thomas, L. (2008). Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873):190–194.
- Pereira, A., Denardin, J. C., and Escrig, J. (2009). How do magnetic microwires interact magnetostatically? *Journal of Applied Physics*, 105(8):083903.
- Pitzschel, K., Bachmann, J., Martens, S., Montero-Moreno, J. M., Kimling, J., Meier, G., Escrig, J., Nielsch, K., and Görlitz, D. (2011a). Magnetic reversal of cylindrical nickel nanowires with modulated diameters. *Journal of Applied Physics*, 109(3):033907.
- Pitzschel, K., Bachmann, J., Martens, S., Montero-Moreno, J.-M., Kimling, J., Meier, G., Escrig, J., Nielsch, K., and Görlitz, D. (2011b). Magnetic reversal of cylindrical nickel nanowires with modulated diameters. *Journal of Applied Physics*, 109(3):033907–033907.

- Pitzschel, K., Bachmann, J., Montero-Moreno, J. M., Escrig, J., Görlitz, D., and Nielsch, K. (2012). Reversal modes and magnetostatic interactions in  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_3\text{O}_4$  multilayer nanotubes. *Nanotechnology*, 23(49):495718.
- Pitzschel, K., Montero-Moreno, J. M., Escrig, J., Albrecht, O., Nielsch, K., and Bachmann, J. (2009). Controlled introduction of diameter modulations in arrayed magnetic iron oxide nanotubes. *ACS Nano*, 3(11).
- Salazar-Aravena, D., Corona, R. M., Goerlitz, D., Nielsch, K., and Escrig, J. (2013). Magnetic properties of multisegmented cylindrical nanoparticles with alternating magnetic wire and tube segments. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 346:171–174.
- Salem, M. S., Sergelius, P., Corona, R. M., Escrig, J., Görlitz, D., and Nielsch, K. (2013). Magnetic properties of cylindrical diameter modulated  $\text{Ni}_8\text{Fe}_{20}$  nanowires: interaction and coercive fields. *Nanoscale*, 5(9):3941–3947.
- Sampaio, L. C., Sinnecker, E. H. C. P., Cernicchiaro, G. R. C., Knobel, M., Vázquez, M., and Velázquez, J. (2000). Magnetic microwires as macrospins in a long-range dipole-dipole interaction. *Physical Review B*, 61(13):8976.
- Scholz, W., Fidler, J., Schrefl, T., Suess, D., Dittrich, R., Forster, H., and Tsiantos, V. (2003). Scalable parallel micromagnetic solvers for magnetic nanostructures. *Computational Materials Science*, 28(2):366–383.
- Stancil, D. D. and Prabhakar, A. (2009). *Spin Waves: Theory and Applications*. Springer.
- Tanase, M., Bauer, L. A., Hultgren, A., Silevitch, D. M., Sun, L., Reich, D. H., Searson, P. C., and Meyer, G. J. (2001). Magnetic alignment of fluorescent nanowires. *Nano Letters*, 1(3):155–158.
- Velázquez, J., Pirota, K. R., and Vázquez, M. (2003). About the dipolar approach in magnetostatically coupled bistable magnetic micro and nanowires. *IEEE transactions on magnetics*, 39(5):3049–3051.
- Weiss, P. (1907). L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 6(1):661–690.
- Yang, S. Y., Seidel, J., Byrnes, S. J., Shafer, P., Yang, C.-H., Rossell, M. D., Yu, P., Chu, Y.-H., Scott, J. F., Ager, J. W., Martin, L. W., and Ramesh, R. (2010). Above-bandgap voltages from ferroelectric photovoltaic devices. *Nature Nanotechnology*, 5(2):143–147.
- Zhan, Q.-F., Gao, J.-H., Liang, Y.-Q., Di, N.-L., and Cheng, Z.-H. (2005). Dipolar interactions in arrays of iron nanowires studied by mössbauer spectroscopy. *Physical Review B*, 72(2):024428.

# Anexo A

## Constantes magnéticas

A lo largo del presente trabajo y con el fin obtener resultados que se aproximen a los datos experimentales, se han utilizado los siguientes valores para las constantes [Guimarães, 2009],

Tabla A.1: Constantes magnéticas para algunos materiales ferromagnéticos.

Material	$M_s$ $10^3 [\text{Am}^{-1}]$	K $10^5 [\text{Jm}^{-3}]$	A $10^{-11} [\text{Jm}^{-1}]$
Fe	1,714	0,481	1,98
Co	1,422	4,12	2,81
Ni	484,1	-0,056	0,86
$\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$	8,13	0,0027	1,07

## Anexo B

# Cálculo de la energía de interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas con diámetro modulado

Como la magnetización es paralela al eje de las nanoestructuras, sólo existirá una contribución superficial debido a las superficies perpendiculares a la magnetización. De esta forma, el potencial magnetostático estará dado por:

$$U = \frac{1}{4\pi} \left( \int_{(z=0)} \frac{\hat{n} \cdot \vec{M}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} ds + \int_{(z=L_1)} \frac{\hat{n} \cdot \vec{M}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} ds + \int_{(z=L_1+L_2)} \frac{\hat{n} \cdot \vec{M}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} ds \right) \quad (\text{B.1})$$

Resolviendo los productos internos se tiene que:

$$U = \frac{M_0}{4\pi} \left( \int_{(z=L_1+L_2)} \frac{ds}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \int_{(z=L_1)} \frac{ds}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \int_{(z=0)} \frac{ds}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \quad (\text{B.2})$$

La función de Green se puede desarrollar en coordenadas cilíndricas de la siguiente forma:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} \int_0^{\infty} [dk J_m(k\rho) J_m(k\rho') e^{-k(z_>-z_<)}], \quad (\text{B.3})$$

Reemplazando esto en el potencial se tiene que,

$$\begin{aligned}
U = \frac{M_0}{4\pi} & \left( \int_{z=L_2+L_1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} \int_0^{\infty} dk J_m(k\rho) J_m(k\rho') e^{-k(z_>-z_<)} ds \right. \\
& - \int_{z=L_1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} \int_0^{\infty} dk J_m(k\rho) J_m(k\rho') e^{-k(z_>-z_<)} ds \\
& \left. - \int_{z=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} \int_0^{\infty} dk J_m(k\rho) J_m(k\rho') e^{-k(z_>-z_<)} ds \right), \quad (B.4)
\end{aligned}$$

Luego de simplificar y agrupar términos semejantes tendremos que,

$$\begin{aligned}
U = \frac{M_0}{4\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{im(\phi-\phi')} d\phi' J_m(k\rho) & \left( e^{-k(L_1+L_2-z)} \int_a^{R_2} J_m(k\rho') \rho' d\rho' \right. \\
& \left. - e^{-k|L_1-z|} \int_{R_1}^{R_2} J_m(k\rho') \rho' d\rho' - e^{-kz} \int_a^{R_1} J_m(k\rho') \rho' d\rho' \right) \quad (B.5)
\end{aligned}$$

Esta expresión puede simplificarse usando la siguiente definición:

$$\int_0^{2\pi} e^{im(\phi-\phi')} d\phi' = 2\pi e^{im\phi} \delta_{m,0} \quad (B.6)$$

De esta manera la energía magnetostática queda definida de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
U = \frac{M_0}{2} \int_0^{\infty} dk J_0(k\rho) & \left( e^{-k(L_1+L_2-z)} \int_a^{R_2} J_0(k\rho') \rho' d\rho' \right. \\
& \left. - e^{-k|L_1-z|} \int_{R_1}^{R_2} J_0(k\rho') \rho' d\rho' - e^{-kz} \int_a^{R_1} J_0(k\rho') \rho' d\rho' \right) \quad (B.7)
\end{aligned}$$

El valor de la integral radial está dado en forma genérica de la siguiente forma:

$$\int_a^b J_0(kx) x dx = \frac{bJ_1(kb) - aJ_1(ka)}{k} \quad (B.8)$$

De manera que el potencial magnetostático es dado por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
U = \frac{M_0}{2} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} J_0(k\rho) & \left( e^{-k(L_1+L_2-z)} [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] \right. \\
& \left. - e^{-k|L_1-z|} [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] - e^{-kz} [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] \right) \quad (B.9)
\end{aligned}$$

A partir del potencial se puede calcular el campo demagnetizante  $\vec{H} = -\vec{\nabla}U$ .

$$H_\rho = -\frac{\partial U}{\partial \rho} = \frac{M_0}{2} \int_0^\infty dk e^{-k(L_1+L_2-z)} [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] - e^{-k|L_1-z|} [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] - e^{-kz} [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] J_1(k\rho) \quad (\text{B.10})$$

$$H_\phi = \frac{1}{\rho} \frac{\partial U}{\partial \phi} = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$H_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = \frac{-M_0}{2} \int_0^\infty dk J_0(k\rho) \left( [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] e^{-k(L_1+L_2-z)} - [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] \frac{\partial}{\partial z} e^{-k|L_1-z|} + [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] e^{-kz} \right) \quad (\text{B.12})$$

Para calcular la derivada de la exponencial se tiene lo siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial z} e^{-k|L_1-z|} = \begin{cases} -k e^{-k(z-L_1)} & z > L_1 \\ k e^{-k(L_1-z)} & z < L_1 \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

De modo que el campo en la dirección  $z$  está dado por:

$$H_z = \frac{-M_0}{2\pi} \int_0^\infty dk J_0(k\rho) \left( [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] e^{-k(L_1+L_2-z)} + [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] e^{-kz} - [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] Sgn(L_1 - z) e^{-k|L_1-z|} \right) \quad (\text{B.14})$$

donde  $Sng(x)$  es la función signo que puede definirse de la siguiente forma:

$$Sgn(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Con lo anterior, se puede calcular la densidad de energía del siguiente modo:

$$\vec{M}_2 \cdot \vec{H}_d = \frac{-M_0^2}{2\pi} \int_0^\infty dk J_0(k\rho) \left( [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] e^{-k(L_1+L_2-z)} + [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] e^{-kz} - [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] Sgn(L_1 - z) e^{-k|L_1-z|} \right) \quad (\text{B.16})$$

Con el resultado anterior, la energía de interacción se puede definir como:

$$E_i = \frac{\mu_0 M_0^2}{2\pi} \int_{V_2} \vec{M}_2 \cdot \vec{H}_d dV_2 = \frac{\mu_0 M_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left( \int_0^{L_1} \int_a^{R_1} H_z(r, z) + \int_{L_1}^{L_1+L_2} \int_a^{R_2} H_z(r, z) \right) \quad (\text{B.17})$$

Resolviendo la integral la energía de interacción es:

$$\begin{aligned}
 E_i = \frac{\mu_0 M_0^2}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{k} J_0(kd) & \left[ [R_1 J_1(kR_2) - a J_1(ka)]^2 (1 - e^{-kL_1}) + [R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] \right. \\
 & [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] (e^{-k(L_1+L_2)} e^{kL_1} + e^{kL_2} - 2) - [R_2 J_1(kR_2) - R_1 J_1(kR_1)] \\
 & ([R_1 J_1(kR_1) - a J_1(ka)] (1 - e^{-kL_1}) - [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)] (1 - e^{-kL_2})) \\
 & \left. + [R_2 J_1(kR_2) - a J_1(ka)]^2 (1 - e^{-kL_2}) \right] \quad (\text{B.18})
 \end{aligned}$$