UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIAS DEPARTAMENTO DE FÍSICA



PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE NANOESTRUCTURAS CILÍNDRICAS MULTISEGMENTADAS.

Diego Felipe Salazar Aravena

Dr. Juan Escrig Murúa

Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias con mención en Física

SANTIAGO - CHILE. 23 de Abril de 2015.

PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE NANOESTRUCTURAS CILÍNDRICAS MULTISEGMENTADAS

Trabajo de Graduación presentado a la Facultad de Ciencias, en cumplimiento parcial de los requerimientos exigidos para optar al grado de Doctor en Ciencias con mención en Física.

Universidad de Santiago de Chile Santiago de Chile 23 de Abril de 2015

PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE NANOESTRUCTURAS CILÍNDRICAS MULTISEGMENTADAS

Diego Felipe Salazar Aravena

Este trabajo de Graduación fue preparado bajo la supervisión del profesor guía Dr. 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

Dra. Dora Altbir	
Dr. Juliano Denardin	
Dr. Juan Escrig	
Dr. Fernando Méndez	
Dr. Alvaro Nuñez	
Dr. Eugenio Vogel	

.....

Directora Departamento de Física

Dedicado a mis padres Ana Luisa y Juan José a mi hermanita Ximena y a mi familia Graciela y nuestro hijo Facundo

Dedicatoria

Ha llegado el fin de una nueva etapa en mi vida, el cual dedico a mis padres **Ana Luisa** y **Juan José** y a mi hermanita **Ximena** que sin tener mucha idea lo que significaba para mí venir a Santiago y comenzar nuevamente otra etapa de estudios me apoyaron incondicionalmente todos los días que he estado lejos físicamente, acompañandome día a día con sus llamados telefónicos y sus visitas a la capital. Me siento orgulloso de ser su hijo y hermano, y tenerlos siempre cada vez que los he necesitado. Los amo mucho.

A mi profesor, guía, consejero y amigo **Dr. David Laroze**, por estar siempre cuando lo necesité. Por ser el culpable de estar aquí, motivarme y apoyarme durante estos 5 años de estudios, aún no se en que momento se le prendió la ampolleta y se le ocurrió este gran desafío. Muchas gracias profe.

A la tía **Tina Soto** y a su familia por dejarme entrar en su hogar por un año, siendo apenas el hijo de una amiga que poco y nada conocía, darme una palabra de aliento, cariño y comida durante toda mi estadía en su casa.

A mis amigos de infancia (**Pato, Natty, Marcelo**, las hermanitas **Claudia**, **Cindy** y **Vania**, **Horacio, Cesar, Landa, Gerald**) que siempre han estado ahí, pendiente de lo que estoy haciendo, de los buenos asados y la buena vida.

A mis malas influencias universitarias: Oscar Ismael Lea, Victor Angel Celestial, Cristobal Cespedes Colorín, Jaime Mardones, Ignacio Espinoza Negro Nacho, Cesar Pinilla Penella, Juan Pablo Carucha, y a las Bknes Jocelyn Sepulveda Negra Jocy, Macarena Berrios Maquita y Emilia Vergara Mily Jose, nunca falto una pilsen porque reunirnos y hacer de nuestra vida universitaria mas agradable. A mis compañeros de pregrado: German Rojas **Germineitor**, Eduardo Roco **Indeo Strong**, Jennifer Díaz **Ñeñy** y Milvia Alata **Miii**. Por hacer el camino mas corto para llegar a ser un profesional.

A mis compañeros y amigos José Julián Soto Lara **Paishano** y David Cortés Ortuño **Deivid Hasel** futuros Doctores, gracias por sus fructíferas conversaciones, por compartir estos años de doctorado experiencias de vida, estudios y compañia a la distancia cada uno en sus puestos desde España e Inglaterra.

A mis compañeros de grupo de nanomagnetismo: Dr. Juan Luis Palma, Dr. Alejandro Pereira, Alvaro Espejo, Rosita Corona, Cristopher Morales, Nicolas Vidal y Felipe Tejo, les agradezco sus colaboraciones y discusiones durante todos estos años juntos. A mis compañeros de doctorado: Nicolas Vargas, Dra. Romina Muñoz, Dr. Vicente Salinas, Dr. Alejandro Riveros, Dr. Juan Francisco Fuentealba, Dra. Claudia Sanchez, Roberto Escobar, Fernanda Garate, Sebastian Castillo, por hacer los días más cortos en el Departamento de Física con su alegría y buen humor durante las largas jornadas de estudio.

Finalmente quiero dedicar este trabajo de tesis a Graciela González **mi Cholita** y a mi hijo Facundo **mi shishito** por llegar en esta última etapa de estudios a ser parte de mi vida, mi familia, mi compañía y mucha alegría, que llenan mi corazón día a día de mucho amor y felicidad, gracias por todas las atenciones y la comprensión que me dan. Se nos viene una nueva vida en el extranjero pero vamos con todo a vivirla a concho, los amo mucho.

Hay gente que es de un lugar no es mi caso, yo estoy aquí de paso... (Tres mil millones de latídos - Jorge Drexler).

Agradecimientos

Quiero Agradecer a mi profesor tutor, **Dr. Juan Escrig Murúa**, por todos estos años de dedicación en nuestros trabajos de investigación, por darme las herramientas para desarrollarme en el área de magnetismo, por darme la posibilidad de viajar y conocer nuevos países gracias a nuestros trabajos, por ayudarme a conseguir financiamiento y darme financiamiento gracias a su proyecto **Fondecyt 1110784**, en el momento que más lo necesitaba. Por darme un gran empuje en el momento que estuve a un paso de dejar este doctorado a un lado. Y en esta última etapa, por dedicarle mucho tiempo a este trabajo de tesis sobre todo en las correcciones y en la presentación final para que saliera perfecta.

A los profesores que fueron parte de mi formación como Doctor en Ciencias: Dr. Jorge Gamboa, Dr. Fernando Méndez, Dr. Juan Carlos Retamal, Dr. Mikhail Plyushchay, Dra. Dora Altbir, Dr. Carlos López. Muchas gracias por sus clases y su tiempo de consultas.

Agradezco al Dr. Román López Ruiz, Dr. Kleber Pirota, Dra. Fanny Béron, Dr. Diego Muraca y a los estudiantes de postgrado Luis, Maria Eugenia, Peterson, Gabriel, Karol y Juan, por su buena acogida, dedicación para enseñarme sus investigaciones y hacerme parte de sus trabajos, además de los buenos momentos fuera del laboratorio durante mi pasantía doctoral en el extranjero en la Universidad Estadual de Campinas UNICAMP, Campinas, Brasil. La que será mi nueva casa durante mi Postdoctorado.

A la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica **CONICYT** por su beca de doctorado en Chile, la beca de asistencia a eventos y cursos cortos y beca de extensión.

Al Centro para el desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología **CEDENNA** a través del financiamiento basal **FB0807** y al grupo Milenio Magnetismo Básico y aplicado a través del proyec-

Agradecimientos

to del profesor Dr. Juan Escrig **P10-061-F** y del proyecto del profesor Dr. David Laroze **P06-022-F** por todo su apoyo durante mi postgrado.

A la IEEE Magnetics Society por becarme y permitir presentar mi trabajo a través de un póster en la Summer School 2013, en la ciudad de Assisi, Italia.

Finalmente quiero agradecer a la Universidad de Santiago de Chile USACH, por sus becas de la **VRIDEI**, de arancel y de apoyo a la investigación. Fue mi hogar durante estos 5 años y me voy feliz con mi Doctorado en Ciencias con mención en Física.

Resumen

Durante los últimos años, las propiedades magnéticas de nanoestructuras con geometrías diversas, tales como conos, cilindros, hilos y tubos fabricados a partir de diversas técnicas, tales como litografía, electrodeposición y deposición de capas atómicas (ALD por sus siglas en inglés) han sido intensamente investigadas. La miniaturización de los sistemas a la escala nanométrica permite la aparición de nuevos fenómenos que pueden ser utilizados en aplicaciones biológicas, médicas y electrónicas. El comportamiento magnético de estas nanoestructuras, tales como las configuraciones de mínima energía y los mecanismos de reversión de la magnetización, son muy sensibles a las variaciones de tamaño y de forma, que a su vez es el resultado de la interacción entre las contribuciones de intercambio, dipolar y de anisotropía, por lo que es fundamental investigar nanoestructuras con nuevas geometrías antes de que éstas sean propuestas como bloques de contrucción en nuevos dispositivos.

El propósito de este trabajo de tesis es investigar las propiedades magnéticas de nanoestructuras cilíndricas multisegmentadas, definidas como una combinación de hilos y tubos magnéticos, como función de sus parámetros geométricos, campo magnético externo aplicado, e interacción magnetostática entre nanoestructuras vecinas. Para llevar a cabo nuestra investigación, hemos realizado simulaciones micromagnéticas utilizando el software libre OOMMF (The Object Oriented MicroMagnetic Framework) realizado por Applied and Computational Mathematics Division (ACMD) del Information Technology Laboratory (ITL) del National Institute of Standars and Technology (NIST), en estrecha cooperación con el Micromagnetic Modeling Activity Group (μ MAG).

A lo largo de este trabajo de tesis hemos generado diversos códigos computacionales que nos han permitido variar las características geométricas del sistema multisegmentado, las características físicas tales como las constantes de magnetización de saturación, la longitud de intercambio, etc., y la magnitud y ángulo en que se aplica el campo magnético externo. De esta forma hemos estudiado el comportamiento del campo coercitivo y la magnetización remanente para diversas geometrías. En el trabajo específico que se presentará se abordaron los siguientes temas:

- Propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo como función de sus parámetros geométricos.
- Dependencia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras cilíndricas hilo/tubo.
- Interacción magnetostática entre nanoestructuras cilíndricas hilo/tubo.

A partir de este estudio, observamos que las curvas de histerésis de las nanoestructuras hilo/tubo exhiben un escalón correspondiente a un anclaje parcial de la pared de dominio en la interfase entre las secciones hilo y tubo. Este comportamiento magnético se produce debido a que el segmento tubo revierte su magnetización antes que el segmento hilo. De esta forma encontramos las condiciones ideales para generar una configuración magnética con dos dominios antiparalelos que podría ser usada para ayudar a estabilizar nanopartículas magnéticas dentro de nanoestructuras cilíndricas multisegmentadas. Sin embargo, estos escalones desaparecen gradualmente a medida que cambiamos el ángulo con el que se aplica el campo externo, permitiendo así controlar la nucleación y liberación de una pared de dominio. Adicionalmente, observamos la nucleación y propagación de paredes de dominio para ángulos pequeños, mientras que para ángulos grandes observamos una rotación cuasi-coherente. Además, cuando se aplica el campo externo a lo largo del eje de las nanoestructuras, los dos saltos de Barkhausen observados para una nanoestructura hilo/tubo aislada dan origen a varios saltos menores para un arreglo débilmente interactuante, que eventualmente se convierte en un único salto para el caso más interactuante. Finalmente, hemos comparado el comportamiento magnético de estas nanoestructuras multisegmentadas con las propiedades observadas en nanohilos y nanotubos.

Abstract

During the last years have been intensely investigated the magnetic properties of nanostructures with various geometries, such as cones, cylinders, wires and tubes made from various techniques, such a lithography, electrodeposition and atomic layer deposition ALD. The miniaturization of systems at the nanoscale, allows the appearance of new phenomena that can be used in biological, medical and technical applications. The magnetic behavior of these nanostructures, such as equilibrium states and mechanisms of magnetization reversal, are very sensitive to variations in size and shape, which in turn is the result of the interaction between the contributions of exchange, dipolar and anisotropy.

The aim of this thesis is to investigate the magnetic properties of multisegmented cylindrical nanostructures, defined as a combination of magnetic wire and tube segments, as a function of their geometric parameters, applied magnetic field, and magnetostatic interactions between neighboring nanostructures. To carry out our research, we performed micromagnetic simulations using the free software OOMMF (The Object Oriented MicroMagnetic Framework) made by Applied and Computational Mathematics Division (ACMD) of Information Technology Laboratory (ITL) of the National Institute of Standars and Technology (NIST), in close cooperation with the Micromagnetic Modeling Activity Group (μ MAG).

Throughout our thesis, we generated various computer codes which have allowed us to vary the geometrical characteristics of multisegmented system, physical characteristics such as the saturation magnetization constant, the exchange length, etc., and the magnitude and angle at which the external magnetic field is applied. Thus, we studied the behavior of the coercive field and remanent magnetization for various geometries. In this specific work we have studied the following topics:

Magnetic properties of wire/tube nanostructures as a function of their geometric parameters.

Abstract

- Angular dependence of the magnetic properties wire/tube nanostructures.
- Magnetostatic interaction between wire/tube nanostructures.

From this study we observed that the hysteresis curves of wire/tube nanostructures exhibits a step corresponding to the domain wall pinning at the interface between the wire and tube sections. This magnetic behavior occurs because the tube segment reverses its magnetization before the wire segment. Thus we find the ideal conditions for generating a magnetic configuration with two antiparallel domains that could be used to help stabilize magnetic nanoparticles inside cy-lindrical multisegmented nanostructures. However, these steps gradually disappear as we change the angle at which the external field is applied, thus enable the nucleation and release of a domain wall. Additionally, we observe for small angles the nucleation and propagation of domain walls, while for large angles we observe a quasi-coherent rotation. Furthermore, when the external field is applied along the axis of the nanostructures, the two Barkhausen jumps observed for an isolated nanostructure, give rise to several minor jumps for a weakly interacting array, which eventually becomes a single hop for the most interacting case. Finally, we compared the magnetic behavior of these multsegmented nanostructures with the observed properties of nanowires and nanotubes.

Índice general

De	dicat	toria	II
Ag	jrade	cimientos	IV
Re	sum	en	VI
Ab	ostrac	ct V	VIII
Ínc	dice c	de figuras	XIII
1.	Intro	oducción	1
	1.1.	Introducción a la nanociencia	1
		1.1.1. Nanoestructuras magnéticas	2
		1.1.2. Límite superparamagnético	3
	1.2.	Espintrónica	5
	1.3.	Modos de reversión de la magnetización	6
		1.3.1. Rotación coherente	8
		1.3.2. Propagación de la pared de dominio tipo vórtice	8
		1.3.3. Propagación de la pared de dominio tipo transversal	9
	1.4.	Nanoestructuras magnéticas multisegmentadas	11
		1.4.1. Nanohilos multisegmentados	13
		1.4.2. Nanotubos multisegmentados	15
		1.4.3. Diagramas de fase y configuraciones magnéticas	18
2.	Micr	romagnetismo	26
	2.1.	Aproximación al continuo	27
	2.2.	Energías involucradas	27

		2.2.1.	Energía de Zeeman	28
		2.2.2.	Energía de Intercambio	28
		2.2.3.	Energía magnetostática	30
		2.2.4.	Energía de anisotropía	35
		2.2.5.	Ecuación de movimiento	37
		2.2.6.	Simulaciones micromagnéticas	39
2	Dro	niodadu	as magnáticas de nancestructuras hilo/tubo como función de sus naráme-	
0.	tros	aeom	étricos	43
	31	Simula	ación micromagnética	43
	3.2	Result		45
	0.2.	3 2 1		45
		322	Mecanismos de reversión de la magnetización	45
		323		48
		324		0 51
	33	Conclu		51
	0.0.	Concil		51
4.	Dep	enden	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo	54
4.	Dep 4.1.	endeno Introdu	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo	54 54
4.	Dep 4.1. 4.2.	endend Introdu Simula	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 54
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3.	endend Introdu Simula Result	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 54 56
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3.	Introdu Simula Result 4.3.1.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3.	Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3.	Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60
4. 5.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. Inte	Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60 63
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 5.1. 5.2	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60 63 63
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 5.1. 5.2. 5.3	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu Simula	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	 54 54 54 56 56 57 59 60 63 63 63 65
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 5.1. 5.2. 5.3.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu Simula Result	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60 63 63 63 65
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 5.1. 5.2. 5.3.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu Simula Result 5.3.1.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	 54 54 54 56 57 59 60 63 63 63 65 65
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 5.1. 5.2. 5.3.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu Simula Result 5.3.1. 5.3.2.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60 63 63 63 63 65 65
4.	Dep 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. Inte 5.1. 5.2. 5.3.	endend Introdu Simula Result 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. Conclu racciór Introdu Simula Result 5.3.1. 5.3.2. 5.3.3.	cia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo ucción	54 54 56 56 57 59 60 63 63 63 65 65 65 66 67

ÍNDICE GENERAL

6. Cor	nclusión y perspectivas	71
6.1.	Conclusión general	71
6.2.	Perspectivas	73
A. Sim	nulaciones micromagnéticas en detalle	74
A. Sim A.1	nulaciones micromagnéticas en detalle . Simulación 1 en extenso	74 74
A. Sim A.1 A.2	nulaciones micromagnéticas en detalle . Simulación 1 en extenso	74 74 76

Índice de figuras

1.1.	Variación de la energía de una partícula con anisotropía uniaxial	3
1.2.	Régimen según tiempo de relajación y tiempo experimental.	4
1.3.	Esquema de los modos de reversión de la magnetización.	7
1.4.	Parámetros geométricos de una nanoestructura cilíndrica	7
1.5.	Nanoestructuras magnéticas multisegmentadas.	12
1.6.	Nanohilo multisegmentado de Co/Cu.	14
1.7.	Curvas de histéresis en superredes de (001) Fe/ (001) Cr	15
1.8.	Magnetorresistencia de tres superredes de Fe/Cr.	16
1.9.	Nanotubos multisegmentados Au-Ni	17
1.10	Representación de distintas geometrías para encapsulamiento magnético	18
1.11	. Evolución de ξ como función del número de pasos de Montecarlo $\ldots \ldots \ldots \ldots$	19
1.12	Parámetros geométricos y configuraciones magnéticas de nanoestructuras multi-	
	segmentadas	20
1.13	. Diagrama de fase para nanoestructuras multisegmentadas con distintos materiales	
	magnéticos	22
1.14	Diagrama de fase para nanoestructuras multisegmentadas con distinto número de	
	segmentos n	22
2.1.	Campo desmagnetizante	34
3.1.	Caracterización geométrica de nanoestructuras investigadas	44
3.2.	Curvas de histéresis para $R = 15 \text{ nm} \dots \dots$	46
3.3.	Curvas de histéresis para $R = 25 \text{ nm} \dots \dots$	47
3.4.	Curvas de histéresis para $R = 50 \text{ nm} \dots \dots$	48
3.5.	Valor promedio de las componentes de los momentos magnéticos	49
3.6.	Coercividad y remanencia	50

ÍNDICE DE FIGURAS

3.7.	Ancho de los escalones en las curvas de histéresis	52
4.1.	Caracterización geométrica de nanoestructuras cilíndricas	55
4.2.	Curvas de histéresis para diversas nanoestructuras como función del ángulo en	
	que se aplica el campo magnético externo	57
4.3.	Propiedades magnéticas de las nanoestructuras	58
4.4.	Valor promedio de las componentes de los momentos magnéticos para $ heta=0^o$	61
4.5.	Valor promedio de las componentes de los momentos magnéticos para $\theta=90^o$	62
5.1.	Parámetros geométricos de un arreglo	64
5.2.	Curvas de histéresis para un arreglo hexagonal	66
5.3.	Reversión de la magnetización de un arreglo interactuante	68
5.4.	Propiedades magnéticas para un arreglo hexagonal	69
A.1.	Primer paso para simular una nanoestructura hilo/tubo	76
A.2.	Segundo paso para simular una nanoestructura hilo/tubo	77
A.3.	Primer paso para simular una nanoestructura hilo/tubo	78
A.4.	Segundo paso para simular una nanoestructura hilo/tubo	79
A.5.	Primer paso para simular un arreglo hexagonal	81
A.6.	Segundo paso para simular un arreglo hexagonal	82
A.7.	Tercer paso para simular un arreglo hexagonal	83
A.8.	Cuarto paso para simular un arreglo hexagonal	84

XIV

Capítulo 1

Introducción

1.1. Introducción a la nanociencia

La nanociencia es un campo que se centra en el desarrollo de nuevas herramientas de síntesis y análisis, en el estudio de los fenómenos y manipulación de materiales a escala nanométrica [1, 2]. Estos sistemas tienen al menos una dimensión en el rango de 10 a 100 nanómetros. Un nanómetro es 10^{-9} metros, alrededor de 10 átomos de hidrógeno. Es de gran interés estudiar las propiedades de los sistemas a esta escala, ya que los materiales de este tamaño muestran propiedades físicas y químicas distintas a las de la escala macroscópica. Como ejemplo, podemos mencionar la longitud característica del ancho de una pared de dominio, la cual se encuentra en el rango de los nanómetros. Dentro de la pared de dominio, los momentos magnéticos apuntan en diversas direcciones, a diferencia de lo que ocurre en un dominio magnético (que tienen una longitud muy superior), donde los momentos magnéticos apuntan todos en la misma dirección.

La nanotecnología es la aplicación de las propiedades únicas de los nanomateriales a la tecnología para la creación de materiales, dispositivos y sistemas con nuevas propiedades y funciones debido a su pequeño tamaño. El campo es interdisciplinar ya que abarca física, química, biología, ciencia de los materiales e ingeniería. Debido al gran interés y la inversión de recursos en esta área, la nanotecnología está creciendo y progresando a un ritmo sin precedentes.

1.1.1. Nanoestructuras magnéticas

Durante los últimos años han sido intensamente investigadas las propiedades magnéticas de nanoestructuras cilíndricas, tales como hilos y tubos. Las propiedades físicas de estos sistemas a escala nanométrica permiten la aparición de nuevos fenómenos que pueden ser utilizados para diversos fines biotecnológicos [3, 4, 5, 6], donde las nanoestructuras magnéticas, al ser de baja densidad, pueden flotar en soluciones y ser útiles en aplicaciones en seres vivos [7], en dispositivos de grabación magnética [8], logrando aumentar la densidad de información, y hoy en día, además, están siendo usadas como tratamiento experimental (hipertermia) del cáncer. El comportamiento magnético de estas nanoestructuras, como las configuraciones de menor energía y los mecanismos de reversión de la magnetización, son muy sensibles a las variaciones de tamaño y de forma, que a su vez es el resultado de la interacción entre las contribuciones de intercambio, dipolar y de anisotropía.

Experimentalmente, estas nanoestructuras pueden ser sintetizadas mediante un proceso electroquímico en el cual se produce el crecimiento de nanoestructuras cilíndricas en los poros de una membrana de óxido de aluminio (Al_2O_3) [9], obteniendo así un alto grado de ordenamiento. En general se sintetizan nanoestructuras magnéticas cilíndricas de materiales ferromagnéticos tales como níquel, cobalto o hierro. Además, se trabaja también con sus aleaciones. Dentro de estos estudios podemos destacar algunos. Por ejemplo, se han medido las velocidades de propagación de un pared de dominio en un nanohilo cilíndrico de permalloy [10], encontrando velocidades muy altas, con valores de 500 m/s para 40 Oe y de 1500 m/s para 49 Oe, muy superiores que las velocidades observadas en nanohilos rectangulares de NiFe [23], donde se midieron 170 m/s para 100 Oe, lo cual permitiría pensar en utilizar estas nanoestructuras como una alternativa para dispositivos espintrónicos. Por otro lado, se han realizado algunas predicciones teóricas sobre las propiedades magnéticas de estas nanoestructuras [11]. Hasta la fecha existen algunos estudios teóricos sobre el efecto de las interacciones magnetostáticas entre nanopartículas con forma cilíndrica [12, 13, 14, 15] y entre elementos con diversas formas regulares [16].

Finalmente, es importante señalar que hoy en día gran parte de la comunidad científica realiza investigación usando simulaciones numéricas. Estas simulaciones permiten investigar sistemas complejos que son difíciles de estudiar, o incluso imposible, utilizando únicamente cálculos analíticos. Además, estas simulaciones permiten reproducir condiciones experimentales que, a veces, son difíciles de satisfacer. Un ejemplo de esto, es el modelamiento de un nanotubo de co-

balto variando su constante de anisotropía realizado por Lebeckia *et al.* [17] a través del software libre OOMMF [18], comparando los parámetros de la distribución de anisotropía experimental con su modelo, obteniendo casi el mismo resultado para una cierta temperatura.

1.1.2. Límite superparamagnético

Los principios básicos de la reversión de la magnetización de un monodominio magnético fueron desarrollados por Stoner y Wohlfarth [19], y Neel [20] en 1948 y 1949, respectivamente. La enegía de una partícula magnética con anisotropía uniaxial presenta dos mínimos, los que se encuentran separados por una barrera energética. Esta partícula permanecerá en uno de estos estados de mínima energía hasta que las perturbaciones térmicas le ayuden a superar la barrera energética. La barrera de energía para la reversión de la magnetización de un monodominio aislado, en ausencia de un campo magnético externo, es:

$$\Delta E = K_u V. \tag{1.1}$$

donde K_u es la constante de anisotropía uniaxial y V es el volumen de la partícula. Estas barreras de energía pueden ser observadas en la figura 1.1.



Figura 1.1: Variación de la energía de una partícula magnética en función del ángulo θ entre la dirección de magnetización y el eje fácil de anisotropía.

Por otro lado, el tiempo promedio de relajación para la reversión de la magnetización debido a perturbaciones térmicas, está definido por la ley de Arrhennius-Neel [20]:

$$\tau = \tau_0 e^{\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)}.$$
(1.2)

donde τ_0 es una constante del orden de 10^{-12} a 10^{-9} segundos, k_B es la constante de Boltzmann igual a $1,38 \times 10^{-23}$ m²kg/s²K y *T* es la temperatura absoluta del sistema. Además, dependiendo de la relación entre el tiempo de relajación τ y el tiempo que demora la medición magnética t_{exp} se tienen dos regímenes, que son graficados en la figura 1.2:

- Para $\tau < t_{exp}$ nos encontramos en un régimen superparamagnético.
- Para τ > t_{exp} nos encontramos en un régimen bloqueado o ferromagnético.





Considerando el límite superparamagnético, en 1997 Charap *et al.* [21] fijaron entonces la existencia de un límite superior para la densidad de almacenamiento de información de 40 Gb/in² (esto suponiendo que no se podría continuar disminuyendo el tamaño de las partículas, ya que se perdería la información). En la actualidad, este límite ha sido ampliamente superado por la empresa Sony [22], consiguiendo una densidad de almacenamiento de información de 148 Gb/in². Si somos capaces de disminuir el tamaño de las partículas, al mismo tiempo que aumentamos su anisotropía, lograremos aumentar aún más la densidad de almacenamiento de información, sobrepasando de esta forma el límite superparamagnético.

1.2. Espintrónica

La espintrónica utiliza no sólo la carga del electrón (usando corriente eléctrica, que se define como el movimiento de cargas), sino que también la propiedad cuántica del espín (usando entonces corriente espín polarizada). Es una tecnología emergente que puede incrementar la funcionalidad de dispositivos futuros. Estos dispositivos prometen combinar tres características altamente codiciadas:

- No volatilidad, es decir, conservan la memoria cuando se corta la corriente.
- Alta densidad de almacenamiento de información.
- Alta velocidad de funcionamiento de los dispositivos.

Estas tres 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 los dispositivos electrónicos, son impuestas por la velocidad a la que un estado de información (por ejemplo, un 1 binario) se puede cambiar a otro estado (por ejemplo, un 0 binario). Para los dispositivos espintrónicos que implican los materiales ferromagnéticos, la cuestión se reduce a conocer la rapidez con que la dirección de la magnetización del elemento magnético se puede invertir. Ésta es una pregunta muy compleja. Por ejemplo, ¿Necesitamos conocer el mecanismo de reversión que será usado para lograr el cambio en la dirección de la magnetización?. ¿Todo el elemento rotará al mismo tiempo, o sólo una parte nucleará la reversión y luego se propagará al resto del elemento?. En este proceso de reversión, se pueden crear paredes de dominio, lugar donde dos regiones opuestamente magnetizadas se encuentran, durante el proceso de reversión de la magnetización [23].

La demanda de almacenamiento de datos de acceso rápido ha inspirado el desarrollo de tecnologías de memoria en base a las paredes de dominio magnético. De esta forma, la manipulación de paredes de dominio en nanohilos ha sido propuesta como una manera de almacenar información [24, 25] o incluso realizar funciones lógicas [26, 27, 28]. Sin embargo, para competir con otras tecnologías, es esencial la operación de alta velocidad, y así lograr una propagación

rápida de paredes de dominio. Para esto se ha comenzado a medir las velocidades de propagación de las paredes de dominio. Por ejemplo, Atkinson *et al.* [10] midieron a temperatura ambiente la velocidad de propagación de una pared de dominio en un nanohilo de Permaloy. Ellos encontraron velocidades extremadamente altas, lo que permite pensar que el movimiento de las paredes de dominio a alta velocidad es una excelente alternativa para futuros dispositivos que utilizarán la espintrónica. De hecho, el movimiento controlado de una serie de paredes de dominio a lo largo de nanohilos, usando pulsos de corriente espín-polarizados, es el ingrediente esencial de la memoria tipo "pista de carreras"[29], una nueva clase de memorias de almacenamiento de información no volátil. En este dispositivo las paredes de dominio representan ceros y unos.

Recientemente, Yan *et al.* [30] han presentado simulaciones micromagnéticas sobre el movimiento de paredes de dominio en nanohilos cilíndricos de Permalloy. Ellos mencionan que la pared de dominio de tipo transversal que aparece en estos sistemas es muy diferente a la observada en cintas magniticas, ya que se produce una ausencia de la caída en la velocidad [31]. Esto introduce una ventaja comparativa de los sistemas cilíndricos en comparación con las cintas magnéticas.

1.3. Modos de reversión de la magnetización

Una nanoestructura cilíndrica, cuya magnetización apunta en la dirección +z, invertirá su magnetización si es que se aplica un campo magnético externo en la dirección -z. Este proceso de reversión de la magnetización ocurrirá a través de diferentes mecanismos como función de los parámetros geométricos de la nanoestructura, o del ángulo en que se aplica el campo magnético externo. Estudios en nanohilos [32, 33, 34, 35] y en nanotubos [36, 37] describen tres procesos de reversión de la magnetización, definidos como: **Rotación coherente**, **Pared de dominio tipo vórtice** y **Pared de dominio tipo transversal**. Estos mecanismos de reversión son mostrados esquemáticamente en la figura 1.3.

A través de la teoría semiclásica del ferromagnetismo [105] es posible encontrar las barreras de energías correspondientes a cada modo de reversión de la magnetización. Para obtener la energía total de la barrera de energía, se considera la suma de la energía dipolar y la energía de interacción para cada modo de reversión, ya sea coherente, vórtice o transversal. Considerando la relevancia de estos cálculos, hemos revisado los cálculos de los modos de reversión en nanotubos magnéticos realizados por P. Landeros *et al.* [37] donde describen la magnetización y



Figura 1.3: Esquema de los modos de reversión de la magnetización en nanoestructuras cilíndricas: (izquierda) rotación coherente, (centro) pared de dominio tipo vórtice y (derecha) pared de dominio tipo transversal.

evalúan la energía total para cada uno de los modos descritos.

Antes de comenzar el cálculo analítico, se definen parámetros geométricos que serán utilizados para calcular las energías de interés, tal como se muestra en la figura 1.4.



Figura 1.4: Descripción de los parámetros geométricos de una nanoestructura cilíndrica uniformemente magnetizada; *a* es el radio interno del tubo, *R* el radio externo, *H* la altura del cilindro y $\beta = a/R$ un parámetro adimensional.

1.3.1. Rotación coherente

La magnetización de un tubo uniformemente magnetizado puede ser descrita como

$$\vec{m} = m_x \hat{x} + m_y \hat{y} + m_z \hat{z},\tag{1.3}$$

donde $m_i = M_i/M_o$ son las componentes cartesianas normalizadas de la magnetización. Si consideramos una rotación coherente tendremos que

$$m_z^C = \cos \theta.$$

De esta forma, la energía de intercambio es cero, ya que las componentes de la magnetización son constantes (al reemplazar en 2.10).

Por otro lado, al reemplazar los términos de la magnetización en la ecuación 2.19, la energía dipolar será

$$E_{dip} = \frac{\pi \mu_0 M_0 H R^2}{2} (1 - \beta^2) (m_x^2 N_x + m_y^2 N_y + m_z^2 N_z).$$
(1.4)

donde los factores desmagnetizantes cumplen la siguiente condición: $N_x + N_y + N_z = 1$.

Por lo tanto, la energía total sólo será la contribución del término de la energía dipolar, descrita como:

$$E^{C}(\theta) = \frac{\pi\mu_{0}M_{0}HR^{2}}{4}(1-\beta^{2})[\sin^{2}\theta + (3\cos^{2}\theta - 1)N_{z}].$$
(1.5)

1.3.2. Propagación de la pared de dominio tipo vórtice

En el caso en que el nanotubo invierta su magnetización a través de la nucleación y propagación de una pared tipo vórtice, ésta estará caracterizada por dos parámetros. El primero es la posición del centro de la pared de dominio (z_{ω}) , donde la magnetización está sobre el plano xy, el cual describe un vórtice perfecto, y el segundo es el ancho de la pared de dominio (ω) .

Luego podemos describir la magnetización tipo vórtice como:

$$\vec{m^{V}}(z) = \begin{cases} \hat{z}, & 0 \le z \le z_{\omega} - \omega/2 \\ m_{\phi}(z)\hat{\phi} + m_{z}(z)\hat{\mathbf{z}}, & z_{\omega} - \omega/2 \le z \le z_{\omega} + \omega/2 \\ -\hat{z}, & z_{\omega} + \omega/2 \le z \le H \end{cases}$$
(1.6)

donde:

$$m_z(z) = \cos \Theta(z).$$

con

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

De esta forma, la magnetización de la pared de dominio en coordenadas cartesianas quedará como

$$\vec{m} = -(m_{\phi}(z)\sin\phi)\hat{x} + (m_{\phi}(z)\cos\phi)\hat{y} + m_{z}(z)\hat{z},$$
(1.7)

con la cual podemos calcular la energía de intercambio, la que estará dada por

$$E_{ex}^{V} = \pi A \omega \ln(1/\beta) + \pi^{3} A R^{2} (1-\beta^{2})/\omega.$$
(1.8)

Es interesante notar que esta energía de intercambio es independiente de la posición de la pared z_{ω} (siempre y cuando exista una pared de dominio, evitando así los efectos de borde).

Por otro lado, la energía dipolar estará dada por (usando ecuación 2.19)

$$E_{dip}^{V} = \pi \mu_0 M_0^2 R^2 \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} [J_1(qR) - \beta J_1(\beta qR)]^2 (f_s + f_v).$$
(1.9)

donde $f_s = f_s(\omega, z_{\omega})$ y $f_v = f_v(\omega, z_{\omega})$ son las contribuciones superficiales y volumétricas de la energía dipolar, respectivamente.

$$f_s \equiv 1 + e^{-qH} - \frac{e - q(H - z_\omega) + e^{-qz_\omega}}{1 + q^2\omega^2/\pi^2} \cosh[\frac{q\omega}{2}].$$
(1.10)

$$f_v \equiv \frac{q\omega/2 - (e^{-q(H-z_\omega)} + e^{-qz_\omega})\cosh[\frac{q\omega}{2}]}{1 + q^2\omega^2/\pi^2} + \frac{1 + e^{-q\omega}}{(1 + q^2\omega^2/\pi^2)^2}.$$
 (1.11)

Finalmente la energía total será la suma de las contribuciones de interacción y dipolar:

$$E^{V} = E_{ex}^{V} + E_{dip}^{V}.$$
 (1.12)

1.3.3. Propagación de la pared de dominio tipo transversal

A diferencia del caso anterior, para la pared de dominio tipo transversal debemos considerar la magnetización en m_x . Así, la magnetización de esta pared puede escribirse como:

$$\vec{m^{T}}(z) = \begin{cases} \hat{z}, & 0 \le z \le z_{\omega} - \omega/2 \\ m_{x}(z)\hat{x} + m_{z}(z)\hat{z}, & z_{\omega} - \omega/2 \le z \le z_{\omega} + \omega/2 \\ -\hat{z}, & z_{\omega} + \omega/2 \le z \le H \end{cases}$$
(1.13)

donde ω es el ancho de la pared transversal y nuevamente $m_z(z) = \cos \Theta(z)$, al igual que como ocurría para el modo tipo vórtice. Es conveniente escribir la magnetización en componentes cilíndricas $\hat{x} = \hat{\rho} \cos \phi - \hat{\phi} \sin \phi$, de forma que la magnetización dentro de la pared se puede describir como:

$$\vec{m} = (m_x(z)\cos\phi)\hat{\rho} - (m_x(z)\sin\phi)\hat{\phi} + m_z(z)\hat{z}.$$
(1.14)

Usando la magnetización anterior es posible calcular la energía de intercambio, la que quedará como:

$$E_{ex}^{T} = \pi^{3} A R^{2} (1 - \beta^{2}) / \omega.$$
(1.15)

Por otro lado, la contribución de la energía dipolar estará dada por:

$$E_{dip}^{T} = \pi \mu_0 M_0^2 R^2 \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} [J_1(qR) - \beta J_1(\beta qR)]^2 (g_s + g_v).$$
(1.16)

donde

$$g_s = \frac{q^2 \omega^2 / 2\pi^2}{1 + q^2 \omega^2 / \pi^2} \left(\frac{q\omega}{2} + \frac{1 + e^{-q\omega}}{1 + q^2 \omega^2 / \pi^2} \right) + f_s$$
(1.17)

y $g_v(\omega, z_\omega) = f_v(\omega, z_\omega)$. Es importante notar que, a pesar de que las contribuciones volumétricas del modo vórtice y transversal son descritas de igual forma, no necesariamente se obtiene el mismo valor ya que el ancho de pared de dominio ω es distinto en ambos casos.

Finalmente, la energía total de una pared de dominio tipo transversal dentro de un nanotubo uniformemente magnetizado será:

$$E^{T} = E_{ex}^{T} + E_{dip}^{T}.$$
(1.18)

1.4. Nanoestructuras magnéticas multisegmentadas

Como los efectos de la miniturización son cada vez más claramente entendidos y controlados, las nanopartículas isotrópicas y anisotrópicas son utilizadas en muchas áreas de aplicaciones. Por ejemplo, nanoestructuras unidimensionales, que incluyen los nanohilos y los nanotubos, constituyen una clase particular de materiales anisotrópicos que están llegando a ser cada vez más importantes como bloques de construcción para nanodispositivos, debido a sus propiedades electrónicas, físicas y ópticas únicas que pueden controlarse con precisión mediante el control de su forma geométrica y tamaños [1, 2]. Además, estas nanoestructuras permiten la resolución de interrogantes físicas fundamentales, tales como los procesos de reversión de la magnetización en nanoestructuras cuasi-ideales, transporte cuantizado o efectos de localización del electrón [38, 39, 40]. Adicionalmente, estas estructuras han sido estudiadas debido a sus potenciales aplicaciones en medios perpendiculares de grabación magnética [41, 42], así como conectores de las futuras generaciones de la electrónica a nanoescala o de dispositivos electroquímicos [43, 44, 45].

También es importante mencionar que existe un creciente interés de parte de la comunidad científica para funcionalizar estas nanoestructuras unidimensionales de modo que puedan ser aplicadas en el área de la biotecnología [46] o en aplicaciones de sensores [47]. Por lo tanto, cada vez es más importante que una nanoestructura unidimensional pueda realizar muchas funciones simultáneamente. La idea es construir nano-objetos de dos o más componentes, con el fin de integrar las propiedades multifuncionales de diferentes objetos en una sola nanoestructura.

En particular, las nanoestructuras magnéticas multisegmentadas son nanoestructuras pseudo-unidimensionales compuestas de diversos segmentos, los que pueden ser magnéticos como no magnéticos. Estas nanoestructuras han recibido considerable atención [48] debido a que pueden ayudar a entender más aún la física fundamental, como por ejemplo los procesos de reversión de la magnetización y los mecanismos espintrónicos. Cabe destacar que estas nanoestructuras han sido consideradas como la base para extender la densidad de almacenamiento magnético más allá del límite superparamagnético [49]. En estos sistemas, una partícula aislada con n segmentos magnéticos puede almacenar hasta 2^n bits, con un volumen mucho mayor que los granos presentes en medios de grabación magnéticos convencionales, batiendo de esta forma las fluctuaciones térmicas y aumentando la densidad de almacenamiento por un factor 2^{n-1} [49, 50]. Las ventajas de estas nanoestructuras cilíndricas en comparación con las partículas superparamagnéticas clásicas radican principalmente en la posibilidad de controlar fa-

Capítulo 1. Introducción

vorablemente su anisotropía, así como su gran momento magnético debido a la magnetización de saturación permanente de los materiales ferromagnéticos. Por ejemplo, si una nanopartícula magnética está compuesta de un segmento, al aplicar un campo magnético realizando un ciclo de histéresis, los momentos magnéticos pueden apuntar sólo en dos direcciones; todos hacia arriba o todos hacia abajo. Por otro lado, si tenemos dos segmentos en una nanoestructura multisegmentada aislada, al aplicar un campo magnético realizando un ciclo de histéresis, los momentos magnéticos pueden apuntar sólo segmentos hacia arriba, un segmento hacia arriba, un segmento hacia arriba, un segmento hacia arriba y el otro hacia abajo, los dos segmentos hacia abajo o un segmento hacia abajo y otro hacia arriba, tal como se muestra en la figura 1.5.



Figura 1.5: Representación de dos nanoestructuras magnéticas aisladas compuestas por: (a) un segmento, capaz de almacenar 2 bits, y (b) dos segmentos, capaz de almacenar 4 bits.

Por un lado, las paredes de dominio pueden ser consideradas como nanoestructuras autoensambladas estables, ya que pueden ser creadas o aniquiladas por una acción externa. De hecho, la manipulación de las paredes de dominio en nanohilos ha sido propuesta como una forma de almacenamiento de información [24, 25] o incluso para realizar funciones lógicas [26, 27, 28]. Así, una cuestión clave para las nanoestructuras multisegmentadas es el control del movimiento de las paredes de dominio durante el proceso de reversión.

Por otro lado, como los mecanismos de reversión de la magnetización están fuertemente relacionados con la coercividad, las mediciones de $H_c(\theta)$ deberían proporcionar información útil sobre los mecanismos de reversión de la magnetización. Por ejemplo, existen muchos trabajos sobre este tema comprendiendo nanohilos magnéticos [51, 52, 53, 54] y nanotubos [55, 56, 57].

Finalmente, es importante señalar que las nanoestructuras magnéticas hilo/tubo han sido intensamente investigadas debido a que pueden ser utilizadas en potenciales aplicaciones y dispositivos [58, 59, 60]. Estas nanoestructuras corresponden a un nuevo tipo de materiales

Capítulo 1. Introducción

unidimensionales que tienen un gran potencial para convertirse en bloques de construcción para dispositivos magnéticos avanzados. Se espera que las propiedades de estas nanoestructuras sean un híbrido entre los nanohilos y los nanotubos. De hecho, se ha investigado el movimiento de una pared de dominio mediante corrientes en estas nanoestructuras [60]. La capacidad para anclar y liberar una pared de dominio mediante la variación de los parámetros geométricos, los valores de corriente o de campo magnético, transforman estas nanoestructuras hilo-tubo en una interesante alternativa para almacenar información o incluso realizar funciones lógicas.

Entre las diferentes técnicas utilizadas para fabricar nanoestructuras unidimensionales [44, 61, 62, 63], la deposición electroquímica en membranas de alúmina porosa hace posible la síntesis de estructuras con una gran razón de aspecto. Estas membranas han atraído un gran interés científico debido a sus características excepcionales tales como su bajo costo, el autoordenamiento de los poros, alta reproducibilidad y un preciso control sobre sus características morfológicas. La principal ventaja de las membranas de alúmina porosa radica en poder controlar sus características geométricas, como el diámetro del nanoporo, longitud y distancia centro-acentro, parámetros que son fácilmente controlados mediante la variación de las condiciones de anodización. En el caso de nanoestructuras unidimensionales, el diámetro puede ser tan pequeño como el límite de un monodominio, mientras que la longitud puede ser varios órdenes de magnitud mayor, lo que resulta en una fuerte anisotropía de forma. Recientemente, Arshad *et al.* [59] sintetizaron nanoestructuras cilíndricas de Co-Pt compuestas de un par de segmentos de nanotubos y nanohilos a través de la electrodeposición directa en membranas porosas. La fabricación de estas nanoestructuras fue posible debido a la penetración de las nanopartículas de oro por bombardeo (sputtering) dentro de la membrana, las que sirvieron como puntos de nucleación.

1.4.1. Nanohilos multisegmentados

Los nanohilos multisegmentados son una clase particular de nanoestructuras multisegmentadas, que han sido investigados los últimos 20 años. Los primeros estudios realizados los años 1994 y 1995 investigaron la magnetorresistencia gigante en nanohilos multisegmentados de Co/Cu [64, 65, 66]. De ahí en adelante se han sintetizado nanohilos multisegmentados con segmentos de diversos materiales, ya sean estos magnéticos, como por ejemplo níquel, así como no magnéticos, como por ejemplo platino, tal como se muestra en la figura 1.6 [67].



Figura 1.6: Imagen TEM (microscopía electrónica de transmisión) con a) baja y b) alta magnificación de nanohilos multisegmentados de Ni-Pt con un diámetro promedio de 50 nm, los cuales han sido liberados desde la membrana de alúmina porosa.

A la fecha, numerosos ejemplos de nanohilos magnéticos multisegmentados de diversos materiales han sido sintetizados, entre los que podemos mencionar Ni/Pt [67], Ni/Cu [68, 69], Ni/Au [70], Co/Cu [64, 66, 71, 72, 73], Fe/Cu [74], NiFe/Cu [75], CoNi/Cu [76, 77], FeCoNi/Cu [78], FeGa/Cu [79], Co/Pt [80], Fe/Pt [81], NiFe/Pt [82], Co/Au [83], y NiCoCu/Cu [84, 85], entre otros.

Magnetorresistencia

La magnetorresistencia es una propiedades que tienen ciertos materiales de variar su resistencia eléctrica cuando son sometidos a un campo magnético. Este efecto fue descubierto por William Thomson en 1857, aunque no fue capaz de disminuir la resistencia en más de un 5 % (hoy en día se llega hasta 600 %).

Investigaciones recientes han permitido descubrir materiales que presentan magnetorresistencia gigante (que puede observarse en un sistema multicapas), magnetorresistencia colosal y magnetorresistencia de efecto túnel. Tanto la magnetorresistencia como la magnetorresistencia gigante se basan en el espín de los electrones y por eso forman parte de la espintrónica.

Un tipo de dispositivo de magnetorresistencia gigante cuenta con capas magnéticas depositadas de tal forma que, en ausencia de un campo magnético externo aplicado, la magnetización de sus capas se orientarán en forma antiparalela entre ellas, debido al acoplamiento ferromagnético débil entre las capas. Por otro lado, al aplicar un campo magnético externo, se orientan en forma paralela a la dirección del campo magnético aplicado, provocando una fuerte caída de la resistencia en el sistema multicapa.

El fenómeno de magnetorresistencia gigante fue observado por primera vez en 1988 [86, 87] en un sistema multicapa de películas cristalinas de Fe/Cr. En este sistema, la magnetización se encuentra en el plano de las capas y el acoplamiento antiferromagnético (AF) entre las capas adyacentes de Fe se produce cuando el espesor t_{cr} del Cr es menor que aproximadamente 30 Å (ver figura 1.7). Cuando el espesor del Cr disminuye por debajo de los 30 Å, el ciclo de histéresis se inclina progresivamente.



Figura 1.7: Curvas de histéresis a 4.2 K con un campo aplicado a lo largo del plano [110] para varias superredes de (001)Fe/(001)Cr: [(Fe $60\dot{A}$)/(Cr $60\dot{A}$)]₅, [(Fe $30\dot{A}$)/(Cr $30\dot{A}$)]₁₀, [(Fe $30\dot{A}$)/(Cr $18\dot{A}$)]₃₀, [(Fe $30\dot{A}$)/(Cr $12\dot{A}$)]₁₀, [(Fe $30\dot{A}$)/(Cr $9\dot{A}$)]₄₀, donde los subíndices indican el número de bicapas en cada muestra. El número que acompaña a cada curva representa el espesor de las capas de Cr.

La magnetorresistencia de superredes de Fe/Cr ha sido estudiada a 4,2 K, donde la resistencia decrece durante el proceso de magnetización y es prácticamente constante cuando la magnetización está saturada, tal como se observa en la figura 1.8. Adicionalmente, se encontró que la resistencia y el campo de saturación disminuyen cuando la temperatura aumenta, típicamente cuando pasamos desde 4,2 K a temperatura ambiente, donde la resistencia se reduce en un factor 2, cuando el campo de saturación se reduce alrededor de un 30 %.

1.4.2. Nanotubos multisegmentados

Actualmente, los nanohilos multisegmentados han sido intensamente investigados por la comunidad internacional [70, 77, 80, 81, 84], mientras que los nanotubos multisegmentados han



Figura 1.8: Magnetorresistencia de tres superredes de Fe/Cr. La corriente y el campo aplicado están sobre el mismo eje [110] en el plano de las capas.

recibido mucho menos atención por parte de los científicos [88, 89], a pesar de que se ha demostrado que el uso de nanotubos multisegmentados puede ayudar a estabilizar nanopartículas magnéticas dentro de nanotubos ferromagnéticos, donde el alineamiento paralelo de los segmentos parece ser menos efectiva en atrapar la partícula ya que sólo el campo creado por una magnetización antiparalela de los segmentos es capaz de restringir el movimiento de las paredes de dominio de las partículas [90, 91]. Por ejemplo, uno de los trabajos que podemos mencionar, corresponde a la síntesis de nanotubos mediante un proceso electroquímico de crecimiento, mediante el cual se obtiene una configuración de apilamiento bimetálica Au-Ni-Au-Ni-Au a lo largo del eje del nanotubo (ver figura 1.9).

Encapsulamiento de materiales magnéticos

Durante los últimos años ha existido un creciente interés por investigar el comportamiento de los materiales en geometrías confinadas en la nanoescala, debido a que estos materiales podrían ser usados en potenciales aplicaciones [92, 93, 94]. Con el descubrimiento de los nanotubos de carbono [61], apareció el interés por encapsular nanopartículas magnéticas en sistemas tubulares [95, 96, 97], abriendo un interesante campo de investigación. Como ejemplo, podemos mencionar que el estudio de la estabilidad de las propiedades magnéticas del Fe encapsulado en nanotubos de Si ha permitido encontrar un momento magnético local grande para cada átomo de



Figura 1.9: Imágenes SEM (microscopía electrónica de barrido) de nanotubos metálicos multisegmentados con una configuración de Au-Ni-Au-Ni-Au a lo largo del eje del tubo. a) Imagen SEM transversal de los nanotubos metálicos producidos dentro de la alúmina porosa, que muestra los nanotubos metálicos incrustados en una matriz de alúmina. Las señales del Au son amarillas y las del Ni son moradas. b) y c) Nanotubos metálicos multisegmentados después de la eliminación de la matriz de alúmina con NaOH (1,0 M).

Fe, así como una transición desde un acoplamiento antiferromagnético a uno ferromagnético, el cual se obtiene aumentando la longitud del nanotubo [98].

Por otra parte, mediante simulaciones de Montecarlo [99] se estudió la estabilidad de una nanopartícula magnética dentro de un nanotubo ferromagnético [90, 91]. Los parámetros considerados son: largo del nanotubo de aproximadamente $L_{tube} = 1 \ \mu m$, radio externo $R_e = 50 \ nm$ y radio interno $R_i = 40 \ nm$, número de segmentos n, y espacio de separación no magnética entre los segmentos d. Además, se consideraron las siguientes configuraciones magnéticas para los segmentos, con flecha amarilla para los segmentos paralelos y con flecha blanca para el segmento antiparalelo con respecto al segmento inicial del tubo, tal como se observa en la figura 1.10.

Como ejemplo para medir la capacidad de encapsulamiento de un nanotubo multisegmentado, se insertó una nanopartícula de dimetro $D = 17 a_0$ dentro el tubo con separación no magnética fija de $d = 51 a_0$ (donde a_0 es el parámero de red de una red BCC de Fe, 0.2866 nm), y se evaluó su comportamiento durante un tiempo de 10^7 pasos de Montecarlo. Mediante el parámetro $\xi = \sqrt{\langle z^2 \rangle}/(L_{tube})/2$, se definió la posición de la nanopartícula dentro del tubo. Así,



Figura 1.10: Ilustración de las diferentes geometrías utilizadas para encapsulamiento, que representan las regiones magnéticas y no magnéticas. La flecha amarilla representa un segmento con magnetización paralela con respecto a la magnetización del tubo inicial, y la flecha blanca representa un segmento con magnetización antiparalela [90].

por ejemplo, si la partícula se encuentra en el centro del tubo, entonces $\xi = 0$. Si la partícula se encuentra en la interfase del segmento magnético y no magnético para tubos de 3 segmentos $\xi = 0,34$, o si se encuentra en la extremo del tubo $\xi = 1$. Se encontró fuera del tubo cuando $\xi > 1$. La figura 1.11 grafica el parámetro ξ con respecto a los pasos de Montecarlo. Para una temperatura de T = 10 K, todos los tubos de dos o más segmentos son capaces de encapsular la nanopartícula, mientras que el tubo simple no. Para T = 300 K, ninguno de los tubos fue capaz de encapsular la partícula, aunque el tubo con dos segmentos alineados antiparalelos fue el que contuvo a la partícula durante más pasos de Montecarlo. Finalmente, para T = 100 K podemos observar que la alineación paralela de los segmentos es menos eficaz en atrapar la partícula en comparación con un alineamiento antiparalelo de éstos.

1.4.3. Diagramas de fase y configuraciones magnéticas

Debido a que los nanotubos multisegmentados bimetálicos [88] exhiben un comportamiento magnético distinto respecto a los nanotubos simples, surge entonces la necesidad de investigar las posibles configuraciones magnéticas presentes en nanotubos multisegmentados. Leighton *et al.* [89] investigaron el ordenamiento magnético de nanoestructuras multisegmentadas. Las estructuras fueron caracterizadas por un conjunto de parámetros geométricos, representados en la figura 1.12, donde W es el largo de cada segmento ferromagnético y d es el largo de cada segmento no magnético, por lo tanto, el largo total de la nanoestructura multisegmentada



Figura 1.11: Evolución de ξ como función del número de pasos de Montecarlo para varias geometrías de tubos (con uno, dos o tres segmentos), diferentes configuraciones magnéticas (alineamiento paralelo o antiparalelo), y varias temperaturas (T= 10, 100, 300 K)[90].

estará dada por L = nW + (n+1)d. Además, R es el radio externo y a el radio interno, por lo que es conveniente definir el parámetro adimensional $\beta = a/R$, donde $\beta = 0$ representa un cilindro sólido y $\beta \rightarrow 1$ corresponde a un tubo muy delgado. Las configuraciones magnéticas de las nanoestructuras son (de izquierda a derecha): Fz cuyo estado de magnetización es cuasi-uniforme paralelo al eje del cilindro (eje z), Fx cuyo estado de magnetización es cuasi-uniforme en el plano, perpendicular al eje z, y V un estado de vórtice de flujo cerrado.

Para realizar los cálculos, los autores adoptaron una descripción simplificada del sistema magnético mediante la cual, la distribución discreta de los momentos magnéticos fue reemplazada por una continua, conocida como la aproximación al continuo. La energía total del sistema es la suma de la energía dipolar, la energía de intercambio y la energía de anisotropía de cada configuración magnética (Fz, Fx y V), ignorando la contribución de la energía de Zeeman. Para el


Figura 1.12: Parámetros geométricos y configuraciones magnéticas de nanoestructuras multisegmentadas [89].

estado Fz, donde la magnetización de los *n* segmentos ferromagnéticos es paralela y uniforme al eje z, $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ fue aproximada por $M_0 \hat{z}$, donde \hat{z} es el vector unitario paralelo al eje del nanotubo. En este caso, la energía total reducida puede ser expresada como:

$$\tilde{E}_{tot}^{Fz} = n\tilde{E}_{self}^{Fz} - \frac{\pi R^3}{l_x^3} \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} e^{-q\frac{W}{R}} (1 - e^{-q\frac{W}{R}}) \times (J_1(q) - \beta J_1(q\beta))^2 g_z(n, q, \sigma),$$
(1.19)

donde

$$g_z(n,q,\sigma) = \frac{(n-1)e^{q\sigma} + e^{-(n-1)q\sigma} - n}{(1-e^{q\sigma})^2} \qquad \sigma = \frac{d+W}{R}.$$
 (1.20)

Por otro lado, para el estado Fx tenemos que $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ puede ser generalmente considerada como $M_0 \cos[(i-1)\theta]\hat{x} + M_0 \sin[(i-1)\theta]\hat{y}$, que representa un estado magnético helicoidal, con θ el ángulo entre la magnetización en el plano de los segmentos adyacentes. Así, la energía total reducida para el estado Fx puede ser expresada como:

$$\tilde{E}_{tot}^{Fx} = n\tilde{E}_{self}^{Fx} - \frac{\pi R^3}{2l_x^3} \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} e^{q\frac{W}{R}} (1 - e^{-q\frac{W}{R}}) \times (J_1(q) - \beta J_1(q\beta))^2 g_x(n, q, \sigma, \theta).$$
(1.21)

donde,

$$g_x(n,q,\sigma,\theta) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} e^{-q\sigma(j-i)} \cos[(j-i)\theta] \qquad \sigma = \frac{d+W}{R}.$$
 (1.22)

Finalmente, para el estado vórtice V, la magnetización $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ puede ser aproximada por $M_0 \hat{\phi}$, donde $\hat{\phi}$ es el vector unitario azimutal. Debido a la condición de perfecto flujo cerrado en la configuración de vórtice, una nanoestructura magnética en una configuración de este tipo no interactúa con las otras nanoestructuras. Así, la energía total reducida para el estado de vórtice está dada solo por las *n* autoenergías:

$$\tilde{E}^{V} = -n \frac{\pi W \ln \beta}{l_{x}} + n \frac{k_{c}}{16} \frac{\pi W R^{2}}{l_{x}^{3}} (1 - \beta^{2}).$$
(1.23)

donde, $k_c = 2k_c/\mu_0 M_0^2$.

Una vez conocidas las energías para cada una de las configuraciones magnéticas posibles de encontrar en nanoestructuras multisegmentadas, es posible investigar la estabilidad relativa de estas configuraciones magnéticas para cuatro materiales magnéticos distintos: Permalloy, hierro, cobalto y níquel. Los diagramas de fase que se observan en la figura 1.13 fueron realizados fijando los siguientes parámetros: $d = l_x$, $\beta = 0.5$ y n = 5. Los diagramas de fase definen tres regiones correspondientes a las configuraciones Fz, Fx y V. En el caso del cobalto, la existencia de una anisotropía uniaxial fuerte favorece la fase Fz, disminuyendo el área de las otras dos fases, especialmente la fase vórtice.

Adicionalmente, los autores también investigaron la estabilidad relativa de las tres configuraciones magnéticas para el permalloy, variando la cantidad de segmentos magnéticos n. Para este caso se fijó el parámetro adimensional $\beta = 0.5$ y $d = l_x$, como podemos ver en la figura 1.14. A partir de esta figura se concluye que a medida que aumentamos el número n de segmentos ferromagnéticos, disminuye el estado V del diagrama de fase y aumenta el estado Fz.



Figura 1.13: Diagrama de fase para nanoestructuras multisegmentadas con distintos materiales magnéticos [89].



Figura 1.14: Diagrama de fase para nanoestructuras multisegmentadas con distinto número de segmentos n [89].

Estructura de la tesis

El propósito de esta tesis es investigar las propiedades magnéticas de nanoestructuras cilíndricas multisegmentadas, definidas como una combinación de hilos y tubos magnéticos, como función de sus parámetros geométricos. En particular, estamos interesados en investigar el efecto sobre las propiedades magnéticas de estas nanoestructuras multisegmentadas al aplicar un campo magnético externo con variación angular, así como investigar el efecto de la interacción magnetostática en arreglos ordenados de estas nanoestructuras. La idea es investigar los procesos de reversión de la magnetización como función de un campo magnético externo aplicado, resolviendo las ecuaciones de Brown y LLG. Para ello utilizaremos el software libre OOMMF [18]. Este trabajo de tesis ha sido organizado de la siguiente forma:

En el capítulo 2 introduciremos los principios básicos de la teoría del continuo utilizada para el cálculo de las energías involucradas. Repasaremos las ecuaciones de Brown y Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) utilizadas en el software OOMMF, y daremos una breve descripción del software OOMMF y las herramientas con las que cuenta para realizar simulaciones.

En el capítulo 3 investigaremos las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo como función de sus parámetros geométricos. Este capítulo exhibe los resultados presentados en el artículo [100].

D. Salazar-Aravena, R. M. Corona, D. Goerlitz, K. Nielsch and J. Escrig, *Magnetic properties of multisegmented cylindrical nanoparticles with alternating magnetic wire and tube segments*, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials 346**, 171-174 (2013).

En el capítulo 4 estudiaremos la dependencia angular de las propiedades magnéticas de nanoestucturas hilo/tubo. Adicionalmente, hemos comparado el comportamiento magnético de

estas nanoestructuras con nanohilos y nanotubos simples. Este capítulo exhibe los resultados presentados en el artículo [101].

D. Salazar-Aravena, J. L. Palma and J. Escrig, *Angular dependence of the magnetic properties of cylindrical nanostructures with wiretube morphology*, **Material Research Express 1**, 026112 (2014).

Finalmente, en el capítulo 5 estudiamos el efecto de las interacciones magnetostáticas sobre las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo. Asumiendo que estas nanoestructuras serán sintetizadas usando membranas de alúmina porosa, las interaccíones magnetostáticas jugarán un rol fundamental sobre sus propiedades magnéticas. Este capítulo exhibe los resultados presentados en el artículo recientemente enviado a referato [102]:

D. Salazar-Aravena, J. L. Palma and J. Escrig, *Magnetostatic interactions between wiretube nanostructures*, **Journal of Applied Physics** (en referato).

Tabla de equivalencia de parámetros geométricos

Como se ha mencionado anteriormente, esta tesis se basa en los resultados presentados en tres trabajos científicos diferentes. De esta forma, los parámetros geométricos de las nanoestructuras que serán presentadas en los capítulos siguientes requieren de una tabla de equivalencias, de modo de simplificar la comprensión al lector.

En esta tesis nos centraremos en nanoestructuras definidas por su radio externo (R en el capítulo 3, $R_{externo}$ en el capítulo 4 y d/2 en el capítulo 5), y su radio interno (a en el capítulo 3, $R_{interno}$ en el capítulo 4 y $\delta/2$ en el capítulo 5), y el largo total (L en el capítulo 3, L_{total} en el capítulo 4 y $L_1 + L_2$ en el capítulo 5) que incluye el segmento hilo (de largo h para el capítulo 3, $L_{nanohilo}$ para el capítulo 4 y L_1 para el capítulo 5) así como el segmento tubo (de largo L-h para el capítulo 3, $L_{total} - L_{nanohilo}$ para el capítulo 4 y L_2 para el capítulo 5). Además, es conveniente definir la relación $\beta = a/R = R_{interno}/R_{externo} = \delta/d$, de manera que $\beta = 0$ representa un cilindro sólido, mientras que $\beta \rightarrow 1$ corresponde a un tubo magnético delgado. Además, definimos $\eta = h/L = L_{nanohilo}/L_{total}$, de modo que un tubo magnético está representado por $\eta = 0$, mientras que un sistema cilíndrico multisegmentado por $\eta = 0.5$.

Capítulo 2

Micromagnetismo

Las propiedades magnéticas de un átomo se deben tanto al movimiento orbital como al espín de los electrones, generando así un momento magnético. Este momento magnético se define como una cantidad vectorial que mide la tendencia a orientarse ante la presencia de un campo magnético. Los materiales pueden clasificarse según su respuesta a los campos magnéticos externo. El diamagnetismo es la propiedad de todos los materiales de oponerse al campo magnético externo aplicado, pero es muy débil. El movimiento orbital de los electrones crea bucles diminutos de corrientes atómicas que producen campos magnéticos [103]. Cuando se aplica un campo magnético externo a un material, estos bucles de corrientes tienden a alinearse de tal manera que se oponen al campo aplicado. Todos los materiales son inherentemente diamagnéticos, pero si los átomos tienen un momento magnético neto como en los materiales paramagnéticos, o si existe un ordenamiento de largo alcance de los momentos magnéticos, como en los materiales ferromagnéticos, estos efectos más fuertes son siempre dominantes. Así, el diamagnetismo es el comportamiento magnético residual de los materiales que no son ni paramagnéticos ni ferromagnéticos. Por otro lado, el paramagnetismo, cuando está presente, es más fuerte que el diamagnetismo y produce magnetización en la dirección del campo aplicado. Estos materiales siguen la Ley de Curie. En la mayoría de los materiales, los momentos magnéticos de los electrones se cancelan, pero en los materiales paramagnéticos, la cancelación es incompleta. En los materiales ferromagnéticos, los espines se alinean de forma paralela unos con otros, es decir, en la misma dirección y sentido bajo una cierta temperatura crítica (temperatura de Curie). Por otro lado, también encontramos materiales antiferromagnéticos definidos como dos subredes ferromagnéticas intercaladas entre sí, donde la magnitud de sus momentos magnéticos es igual pero con sentidos opuestos. Finalmente, se definen los materiales ferrimagnéticos como un antiferromagneto pero con distinta intensidad en los momentos magnéticos de cada subred.

El ferromagnetismo tiene su fundamento en la mecánica cuántica y puede ser descrito mediante el hamiltoniano de Heisenberg. Sin embargo, considerando el gran número de átomos que constituyen una nanoestructura cilíndrica multisegmentada, es imposible resolver el problema resolviendo el hamiltoniano de Heisenberg, y tenemos que recurrir a ciertas aproximaciones.

2.1. Aproximación al continuo

Para estudiar nuestras nanoestructuras recurrimos a la aproximación al continuo conocida como teoría del micromagnetismo, la cual deja a un lado los detalles discretos de la estructura atómica y considera al material como un continuo [104, 105]. De esta forma, comenzamos dividiendo el volumen de la nanoestructura magnetizada en volúmenes infinitesimales dV, definidos por un vector de posición \vec{r} . Estos volúmenes son suficientemente grandes como para contener una gran cantidad de momentos magnéticos, debido a la magnetización de cada átomo dentro de la red, pero suficientemente pequeños como para que los momentos magnéticos varíen lentamente dentro de él. Por lo tanto, podemos definir el vector de magnetización $\vec{M}(r)$, tal que el producto $\vec{M}(r)dV$ representa el momento magnético neto del volumen infinitesimal dV.

Por otro lado, gracias al gran desarrollo computacional de los últimos años, es posible estudiar las propiedades magnéticas de nanoestructuras usando simulaciones micromagnéticas. Es así como el último tiempo han aparecido numerosos programas que permiten realizar simulaciones micromagnéticas, los que permiten investigar la evolución del sistema, y calcular paso a paso la magnetización a través de la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (2.41). Por lo tanto, estos programas permiten obtener la dinámica de los momentos magnéticos e investigar los mecanismos de reversión de la magnetización de una cierta nanoestructura.

2.2. Energías involucradas

Para realizar el estudio de las propiedades magnéticas en una cierta nanoestructura, debemos describir las distintas contribuciones energéticas que actúan sobre ella. Debemos considerar la energía de Zeeman que surge de la interacción de la nanoestructura con un campo magnético externo, la energía de intercambio debido al traslape de las funciones de onda vecinas en el material, la energía magnetostática originada por las interacciones de largo alcance entre

los dipolos magnéticos dentro del material y la energía de anisotropía definida por la simetría cristalina del material.

2.2.1. Energía de Zeeman

La energía de Zeeman se origina a partir de la energía potencial de los momentos magnéticos de una nanoestructura, en presencia de un campo magnético externo. En el modelo discreto cada átomo posee un momento magnético descrito como:

$$\vec{\mu_m} = \mathbf{g}\mu_B \vec{S}, \tag{2.1}$$

donde g es el factor de Landé, μ_B es el magnetón de Bohr y \vec{S} es el momentum angular total. Por lo tanto, la energía de interacción de un momento magnético con un campo magnético externo estará dado por:

$$e_z = -\vec{\mu_m} \cdot \vec{B}. \tag{2.2}$$

De esta forma, la energía de Zeeman total E_z se define como

$$E_z = -\sum_{i=1}^{N_{at}} \vec{\mu_{mi}} \cdot \vec{B}, \qquad (2.3)$$

donde N_{at} es el número de átomos en un volumen V. Del mismo modo es posible reescribir esta expresión como una aproximación continua, asumiendo el límite termodinámico, debido a la gran cantidad de átomos N_{at} . Para ello debemos describir la magnetización total como $\vec{M} = n \vec{\mu_m}$, donde $n = N_{at}/V$ y la inducción magnética $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$. De esta forma obtendremos que la expresión de la energía quedará como:

$$E_z = \int_V e_z dV = -\mu_0 \int_V \vec{M} \cdot \vec{H} dV.$$
(2.4)

Cabe destacar que esta energía presenta un mínimo cuando la magnetización \vec{M} se encuentra alineada con el campo magnético externo aplicado \vec{H} .

2.2.2. Energía de Intercambio

La interacción de intercambio entre los momentos magnéticos de un material es responsable de que todos los momentos magnéticos prefieran apuntar en la misma dirección, independientemente de cual dirección sea ésta. Su origen no tiene análogo clásico y es causado por el traslape de las funciones de onda de los electrones vecinos. Cuando los espines son paralelos, la energía de intercambio se reduce, obteniendo así una configuración más estable. La energía de interacción entre un par de momentos magnéticos vecinos está definida como:

$$e_{ex} = -J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \tag{2.5}$$

donde J_{ij} es la constante de acoplamiento entre espines atómicos, cuyo valor está dado por las integrales de intercambio entre las funciones de onda asociadas con los átomos i y j. Si se trata de átomos de un material ferromagnético, J > 0, por otro lado, J < 0, si el material es antiferromagnético.

Es posible obtener la energía de intercambio total del material sumando sobre todos los pares de primeros vecinos:

$$E_{ex} = -J \sum_{ij} \vec{S_i} \cdot \vec{S_j} = -JS^2 \sum_{ij} \cos \phi_{ij}.$$
(2.6)

con ϕ_{ij} igual al ángulo formado por los espines vecinos \vec{S}_i y \vec{S}_j . En un material ferromagnético, este ángulo siempre es pequeño, es decir, $|\phi_{ij}| << 1$, lo que nos permite expandir el coseno a primer orden:

$$E_{ex} = -JS^2 \sum_{ij} \left(1 - \frac{\phi_{ij}^2}{2} \right) = E_{ex}^0 + \frac{JS^2}{2} \sum_{ij} \phi_{ij}^2,$$
(2.7)

donde el primer término es independiente de la configuración magnética del sistema, ya que sólo nos entrega el valor de los espines alineados en una misma dirección, obteniendo así una energía de intercambio base. El segundo término corresponde a la energía de intercambio producida por las variaciones en la magnetización de átomos vecinos. Como se mencionó anteriormente, se consideró un volumen suficientemente pequeño que no permitiera grandes variaciones en la dirección de los momentos magnéticos vecinos. De esta forma, es posible utilizar una aproximación debido a que el ángulo ϕ_{ij} que forman los momentos magnéticos vecinos $\vec{m_i}$ y $\vec{m_j}$ es pequeño. Realizando entonces una expansión en serie de Taylor se tiene que:

$$|\phi_{ij}| \approx |\vec{m_i} - \vec{m_j}| \approx \left| r_{ix} \frac{\partial}{\partial x} + r_{iy} \frac{\partial}{\partial y} + r_{iz} \frac{\partial}{\partial z} \right| \vec{m} = (\vec{r_i} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m},$$
(2.8)

donde $\vec{r_i}$ es el vector que une a los momentos magnéticos *i* y *j*. Por lo tanto, si sumamos sobre todos los momentos magnéticos obtendremos que

$$E_{ex} = \frac{JS^2}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{S_i} [(\vec{r_i} \cdot \vec{\nabla})\vec{m}]^2.$$
(2.9)

Es interesante notar que la primera suma corre sobre todos los sitios de la red, mientras que la segunda suma corre sólo sobre los sitios que son primeros vecinos del átomo *i*. Luego, si cambiamos la sumatoria sobre *i* por una integral sobre todo el material ferromagnético, se tiene que:

$$E_{ex} = A \int [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] dV.$$
 (2.10)

donde A es la constante de stiffness o de rigidez del material, definida como:

$$A = \frac{JS^2}{a}c\tag{2.11}$$

donde *a* es la constante de red y *c* corresponde al número de átomos en una celda unitaria. De esta forma, c = 1 para los átomos en una base cúbica simple (sc), c = 2 para una red cúbica centrada en el cuerpo (bcc) y c = 4 para una red cúbica centrada en las caras (fcc).

Físicamente la energía de intercambio tiende a alinear los momentos magnéticos, permitiendo que los átomos de una cierta distancia permanezcan paralelos. La configuración de mínima energía se obtiene cuando la magnetización es uniforme y no varía dentro del material ferromagnético. La longitud de intercambio es la distancia en la que la magnetización es aproximadamente constante y está determinada por la raíz de la constante de stiffness y la densidad de energía desmagnetizante.

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M^2}}.$$
 (2.12)

2.2.3. Energía magnetostática

La energía magnetostática es también conocida como energía desmagnetizante o energía dipolar. Esta energía debe su origen a la interacción dipolar existente entre la magnetización del material y el campo desmagnetizante $\vec{H_d}$. Esta energía es de largo alcance pero de magnitud pequeña. Su expresión discreta, en ausencia de fluctuaciones térmicas, se define como:

$$E_{dip} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{\mu_i} \cdot \vec{h_i}.$$
(2.13)

donde $\vec{\mu_i}$ es el dipolo magnético ubicado en la *i*-ésima posición de un arreglo y $\vec{h_i}$ es el campo producido por todos los demás dipolos magnéticos en la posición *i*. A partir de la ecuación 2.13, es posible llevar la expresión anterior al límite del continuo considerando la aproximación de una esfera físicamente pequeña.

Esfera físicamente pequeña

Vamos a considerar una esfera físicamente pequeña de radio R en el sitio i, tal que dentro de esta esfera los momentos magnéticos discretos apuntan todos en la misma dirección debido a la fuerte interacción de intercambio, mientras que fuera de esta esfera vamos a considerar los momentos magnéticos como una distribución continua \vec{M} . De este modo podemos escribir el campo del material $\vec{h_i}$ como:

$$\vec{h}_i = \vec{H}_{dip} + \frac{4\pi}{3}\vec{M} + \vec{h}'_i.$$
(2.14)

donde $\vec{h'_i}$ es el campo dentro de la esfera debido a los dipolos discretos. Luego, podemos expresar el campo magnetostático dentro de la esfera como:

$$\vec{h}'_{i} = \sum_{|r_{ij}| \langle R} \left[-\frac{\vec{\mu}_{j}}{|r_{ij}|^{3}} + \frac{3(\vec{\mu}_{j} \cdot \vec{r}_{ij})\vec{r}_{ij}}{|r_{ij}|^{5}} \right].$$
(2.15)

donde $\vec{r_{ij}}$ es el vector que va desde el sitio *i* al sitio *j* de la red. Podemos entonces escribir una de las componentes del campo en coordenadas cartesianas, obteniendo de esta forma:

$$h'_{ix} = \sum \left[-\frac{\mu_x}{r_{ij}^3} + \frac{3x_{ij}(\mu_{X_{ij}}x_{ij} + \mu_{Y_{ij}}y_{ij} + \mu_{Z_{ij}}z_{ij})}{r_{ij}^5} \right].$$
 (2.16)

para el caso cuando la red tenga simetría cristalina cúbica, donde x, y, z son términos intercambiables y los productos $X_{ij} Y_{ij}$ con $X_{ij} Z_{ij}$ se anulan, entonces la componente h'_{ix} es igual a cero. Análogamente, obtendremos el mismo resultado para las otras dos componentes. Por otro lado, en el caso que la simetría cristalina no sea cúbica, la sumatoria anterior resultará distinta de cero, igual que para las otras dos componentes. Por lo tanto, $\overrightarrow{\Lambda}$ será el tensor que dependerá de la simetría cristalina [105]:

$$\vec{h}'_i = \overleftarrow{\Lambda} \cdot \vec{M}.$$
 (2.17)

Finalmente, la energía magnetostática [106] integrada sobre toda la nanoestructura ferromagnética estará dada por: Capítulo 2. Micromagnetismo

$$E_{dip} = -\frac{1}{2} \int_{V} \vec{M} \cdot \left(\vec{H}_{dip} + \frac{4\pi}{3} \vec{M} + \overleftarrow{\Lambda} \cdot \vec{M} \right) dV.$$
(2.18)

Como el segundo término de la integral $\vec{M} \cdot \vec{M} = M_0^2$ depende sólo de la temperatura y no de la distribución espacial de \vec{M} , se puede omitir redefiniendo el cero de la energía magnetostática, lo cual no afectará un proceso de minimización de esta energía. El tercer término corresponde a una densidad de energía $\vec{M} \cdot \vec{\Lambda} \cdot \vec{M}$, que puede y debe ser incluido como una anisotropía cuando $\vec{\Lambda}$ sea distinto de cero. Lo anterior debido a que las constantes de anisotropía se obtienen a partir de valores experimentales, por lo que este término ya está incluido. Finalmente, la energía magnetostática en el continuo queda definida como:

$$E_{dip} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{H_{dip}} \cdot \vec{M} dV.$$
(2.19)

de manera tal que el factor $\frac{1}{2}$ tiene relación con que la fuente de $\vec{H_{dip}}$ es \vec{M} , es decir, es una autoenergía [107].

Campo desmagnetizante

El campo desmagnetizante, también conocido como campo magnetostático, es el campo generado por la magnetización de la muestra y puede ser calculado a partir de las ecuaciones de Maxwell

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$
 $\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0.$ (2.20)

de modo que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H_{dip}} = 0 \qquad \qquad \vec{\nabla} \times \vec{H_{dip}} = 0.$$
(2.21)

Luego, como el rotor de $\vec{H_{dip}}$ es cero, es posible obtener el campo debido al gradiente de un potencial escalar, que a su vez es conocido como el potencial desmagnetizante U_{dip} .

$$\vec{H_{dip}} = -\vec{\nabla}U_{dip}.$$
(2.22)

Para entender el comportamiento y origen del campo demagnetizante, es posible considerarlo como análogo del campo eléctrico, donde al tener un material con una cierta polarización \vec{P} , esta polarización conducirá cargas eléctricas en la superficie del material, creando un potencial electrostático que estará descrito por la ecuación de Poisson [107]. Del mismo modo, en un material ferromagnético nos encontramos con un efecto similar, pero en este caso con el de la magnetización, ya que si M es continua dentro del material, entonces contaremos con una densidad de carga magnética efectiva ρ dada por la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 U_{dip} = \vec{\nabla} \cdot \vec{M} = -\rho. \tag{2.23}$$

pero en la superficie del material, la magnetización M ya no será continua, y entonces cambiará su valor bruscamente de M_0 a 0. De esta forma, tendremos cargas magnética superficiales en los bordes del material cuya densidad σ estará dada por:

$$U_{dip}^{fuera} = U_{dip}^{dentro}, \qquad \left. \frac{\partial U_{dip}}{\partial n} \right|_{fuera} - \left. \frac{\partial U_{dip}}{\partial n} \right|_{dentro} = -\vec{M} \cdot \hat{n} = -\sigma$$
(2.24)

con \hat{n} el vector unitario normal a la superficie. Las cargas magnéticas en la superficie del material son la fuente del campo desmagnetizante opuesto a la magnetización del material. Por lo tanto, el término energético favorece la magnetización paralela a la superficie. Por consiguiente, el potencial magnetostático se puede expresar como:

$$U(\vec{r})_{dip} = -\frac{1}{4\pi} \int_{V} \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{M}}{|r - r'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \int_{S} \frac{\hat{n'} \cdot \vec{M}}{|r - r'|} dS'.$$
(2.25)

de modo que al minimizar esta energía dipolar lo que hacemos es rotar los dipolos magnéticos de la muestra, tal que en la superficie se encuentre el mínimo de cargas magnéticas, dividiendo entonces el material en numerosos dominios magnéticos que apuntan en direcciones opuestas, tal como se muestra en la figura 2.1, dominios magnéticos propuestos por Weiss en 1907 [108]. Es así que al aumentar el número de dominios magnéticos, cancelamos las cargas magnéticas de los dominios adyacentes, minimizando entonces la energía dipolar.

La formación de los dominios magnéticos surge del balance entre la energía de intercambio y la energía magnetostática, dominios que estarán separados por un espesor mayor a la longitud de intercambio. Este espesor es influenciado por la energía de anisotropía, el cual fuerza los momentos magnéticos a alinearse a lo largo de un eje o plano fácil. Como un ejemplo podemos mencionar que si tenemos dos dominios antiparalelos a lo largo del eje fácil de la muestra, los dipolos en la pared de dominio rotarán fuera del eje fácil de la muestra, por lo cual la energía de anisotropía tratará de crear paredes delgadas, mientras que la energía de intercambio tratará de agrandarlas.



Figura 2.1: Esquema del campo desmagnetizante generado por diferentes configuraciones de dominios: (a) monodominio, (b) dos dominios, (c) cuatro dominios, (d) dominios cerrados.

Interacción magnetostática entre las nanoestructuras

Como mencionamos anteriormente, la interacción magnetostática o dipolar es de largo alcance, por lo que en principio, un arreglo de nanoestructuras puede exhibir un comportamiento magnético diferente al observado para una nanoestructura aislada. Esto es justamente lo que estamos interesados en investigar en uno de los capítulos de esta tesis. Para encontrar una expresión analítica para la energía de interacción magnetostática entre dos nanoestructuras, comenzaremos con lo más simple. La energía dipolo-dipolo entre dos momentos magnéticos μ_i y μ_j separados una distancia r_{ij} está definida como:

$$E_{ij} = \frac{\mu_o}{4\pi} \frac{[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{n}_{ij})]}{r_{ij}^3}$$
(2.26)

donde \hat{n}_{ij} es el vector unitario que conecta a los dos momentos magnéticos.

Si la expresión anterior se lleva al continuo, entonces la energía de interacción magnetostática entre sistemas magnéticos con geometría arbitraria se obtiene gracias a la aproximación semiclásica de Brown [104]. Aquí la magnetización total será $\vec{M} = \sum_{i=1}^{N} \vec{M_i}$, donde $\vec{M_i}$ será la magnetización de la i-ésima nanoestructura. De esta forma, la energía de interacción magnetostática será:

$$E_{dip} = \sum_{i=1}^{N} E_{dip}(i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} E_{int}(i,j).$$
(2.27)

con

$$E_{dip}(i) = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M_i} \cdot \vec{\nabla} U_i dV$$
(2.28)

como la contribución dipolar a la autoenergía de la i-ésima nanoestructura, y

$$E_{int}(i,j) = \mu_0 \int_V \vec{M}_i \cdot \vec{\nabla} U_j dV$$
(2.29)

la interacción magnetostática entre ellas.

2.2.4. Energía de anisotropía

La energía de anisotropía se asocia a las direcciones preferenciales de la magnetización. Es importante mencionar que existen varios tipos de anisotropía, siendo la más común la anisotropía magnetocristalina que ocurre debido a las interacciones espín-orbita de la red cristalina, produciendo que los espines se alinean preferentemente en ciertas direcciones. De este modo, hay direcciones en las que es más fácil magnetizar una partícula. Una manera de poder visualizar la anisotropía de un material es a través de su curva de histéresis. Estas curvas describen la magnetización del material con respecto al campo magnético externo aplicado, mostrando la resistencia del material a ser magnetizado. Así, mientras mayor sea el campo de anisotropía, mayor será el campo coercitivo en la curva de histéresis del material.

Es importante mencionar que la energía magnetocristalina es pequeña en comparación con la energía de intercambio, pero es ésta, junto con la energía dipolar, quien determina la dirección de la magnetización, ya que la energía de intercambio es isotrópica, es decir, que su magnitud no depende de la dirección en la cual el material está magnetizado.

Hoy en día somos capaces de evaluar cuantitativamente la interacción espín-orbita a partir de cálculos de primeros principios. Sin embargo, estos resultados no siempre se ajustan a los resultados experimentales. Es por ello que, en general, la energía de anisotropía se escribe mediante expansiones en series de potencia, considerando la simetría del cristal, con coeficientes que obtenemos desde los experimentos.

Anisotropía uniaxial

La anisotropía de los cristales hexagonales se describe como función de un único parámetro, el ángulo θ entre el eje de fácil magnetización c (semieje mayor de la estructura cristalina) y la magnetización. Experimentalmente se conoce que la energía es simétrica en el plano ab de la red hexagonal, de forma que es posible modelar la anisotropía como una serie de potencia de pares de $\cos \theta$. Los primeros dos términos son:

$$\omega_u = -K_1 \cos^2 \theta + K_2 \cos^4 \theta = -K_1 m_z^2 + K_2 m_z^4.$$
(2.30)

donde *z* es paralelo al eje cristalográfico *c*, y $\hat{m_z} = \vec{M_z}/M_0$ es el vector unitario paralelo al vector de magnetización. Por simplicidad, la energía de anisotropía uniaxial por unidad de volumen generalmente se escribe como:

$$\frac{E_u}{V} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta = K_1 (1 - m_z^2) + K_2 (1 - m_z^2)^2.$$
(2.31)

Los coeficientes K_1 y K_2 son constantes que dependen de la temperatura, cuyos valores se obtienen a partir de los experimentos. En la mayora de los casos el término K_2 es muy pequeño en comparación con el término K_1 , por lo que en general se desprecia ($|K_2| << |K_1|$). Cuando $K_1 > 0$ la energía de anisotropía uniaxial exhibe dos mínimos, ($\theta = 0$ y $\theta = \pi$), mientras que cuando $K_1 < 0$ la energía es mínima sólo para $\theta = \pi/2$.

Anisotropía cúbica

Para cristales cúbicos, la expansión debe ser invariante al realizar cualquier permutación de los ejes, es decir, si *x* es reemplazado por *y*, y así sucesivamente, cuando los ejes *x*, *y*, *z* están definidos a lo largo del eje cristalográfico. Una vez más son despreciadas las potencias impares, así que la expansión de segundo orden será $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$ igual a una constante. Por lo tanto la expansión comienza con términos de cuarto orden.

$$\omega_c = K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + K_2 (m_x^2 m_y^2 m_z^2),$$
(2.32)

donde, por ejemplo, $K_1 > 0$ para el hierro, de modo que su eje fácil está a lo largo de (100), mientras que cuando $K_1 < 0$ para el níquel, el eje fácil está a lo largo de la diagonal del material en (111).

Finalmente la energía de anisotropía cúbica por unidad de volumen se define como

$$\frac{E_c}{V} = K_1(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2).$$
(2.33)

Anisotropía de forma

La anisotropía de forma no es otra cosa que las direcciones preferenciales para la magnetización debido a la energía magnetostática de una nanoestructura. De este modo, una partícula esférica no presenta anisotropía de forma, por lo que, a no ser que tenga una anisotropía magnetocristalina, esta partícula no presentará direcciones preferenciales para su magnetización. Por otro lado, si la partícula presenta una geometría distinta a la de una esfera, entonces la magnetización será fuertemente influenciada por su anisotropía de forma. Por ejemplo, sobre la superficie de un elipsoide de revolución uniformemente magnetizado encontraremos polos magnéticos libres, los que producirán un campo desmagnetizante en su interior. De esta forma tendremos una energía de anisotropía de forma descrita como

$$E_{dip} = \frac{1}{2}\mu_0 M_0^2 V (N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2),$$
(2.34)

donde m_x, m_y, m_z , son las componentes de la magnetización y N_x, N_y, N_z son los factores desmagnetizantes relativos a los ejes x, y, z, respectivamente. Si $N_x = N_y$ entonces tendremos que:

$$E_{dip} = \frac{1}{2}\mu_0 M_0^2 V(N_z \cos^2\theta + N_x \sin^2\theta),$$
(2.35)

donde θ es el ángulo entre la magnetización y el eje polar z, N_z es el factor demagnetizante a lo largo del eje polar, $N_x = N_y$ es el factor demagnetizante a lo largo del eje ecuatorial. En la literatura, también es posible encontrar esta energía como:

$$E_{dip} = K_s V \sin^2 \theta, \tag{2.36}$$

donde $K_s = \frac{1}{2}\mu_0 M_0^2 (N_x - N_z)$ es la constante de anisotropía de forma. Si $K_s > 0$ tendremos un eje de fácil magnetización, identificado por dos mínimos de energía a lo largo del eje polar z. Si por el contrario tenemos $K_s < 0$, entonces estaremos en presencia de un plano de fácil magnetización en el eje ecuatorial *xy*.

2.2.5. Ecuación de movimiento

Ecuación Diferencial de Brown

La energía total del sistema puede calcularse únicamente si la magnetización de una partícula ferromagnética es alguna función del espacio, $\vec{m_0}$. El problema entonces es determinar $\vec{m_0}$ de manera que la energía total sea un mínimo. A partir de esto, Brown [104, 105] minimizó esta energía considerando una pequeña variación en el vector de magnetización alrededor de $\vec{m_0}$, tal que, la magnitud de \vec{m} debe ser igual a 1. De esta manera, obtuvo la ecuación diferencial que hoy en día lleva su nombre.

$$\vec{m} \times \left(2A\nabla^2 \vec{m} + M_0 \vec{H} - \frac{\partial \omega_s}{\partial \vec{m}}\right) = 0.$$
(2.37)

donde $\vec{H} = \vec{H_a} + \vec{H_{dip}}$. Esta ecuación implica que el torque es cero en todas partes y que la magnetización es paralela al campo efectivo.

$$\vec{H_{eff}} = \frac{2A}{M_0} \nabla^2 \vec{m} + \vec{H} - \frac{1}{M_0} \frac{\partial \omega_s}{\partial \vec{m}}.$$
(2.38)

Para resolver esta ecuación debemos considerar condiciones de borde, escritas en forma vectorial y que dependen de la anisotropía superficial (ω_s).

$$\vec{m} \times \left(2A\frac{\partial \vec{m}}{\partial n} + \frac{\partial \omega_s}{\partial \vec{m}}\right) = 0.$$
 (2.39)

Ecuación Dinámica (LLG)

La magnetización dependiente del tiempo se obtiene a partir de la precesión de la magnetización en un campo magnético, considerando el campo efectivo 2.38. Por otro lado, se puede utilizar la ecuación de Brown 2.37 para definir:

$$\frac{d\dot{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times H_{eff}^{\rightarrow}.$$
(2.40)

donde γ_0 es la razón giromagnética:

$$\gamma_0 = \frac{g|e|}{2m_ec}$$

De esta forma, la ecuación diferencial de **Brown** 2.37 puede ser considerada como un caso partícular de la ecuación 2.40, ya que obtenemos equilibrio estático cuando no hay variación temporal. Luego, la ecuación 2.40 representa una precesión no amortiguada de la magnetización. Sin embargo, experimentalmente se observa que la magnetización decae en un tiempo finito, por lo que el amortiguamiento se agrega como un término fenomenológico, modificando la ecuación 2.40 por la ecuación que describimos a continuación:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \left(\vec{H_{eff}} - \eta \frac{d\vec{M}}{dt} \right).$$
(2.41)

donde η es el amortiguamiento. Esta ecuación se conoce como la ecuación de **Landau-Lifshitz**-**Gibert**.

2.2.6. Simulaciones micromagnéticas

El estudio teórico de alguna partícula nanométrica, basado en la distribución discreta de los momentos magnéticos, debiera consumir muchísimo tiempo y eventualmente, ser imposible de calcular usando los computadores actuales. La razón es el número gigantesco de momentos magnéticos existente dentro de estas nanoestructuras, que puede llegar a exceder los 10⁸. Con esto en mente, en esta tesis usaremos simulaciones micromagnéticas utilizando el programa OOMMF [18].

OOMMF

OOMMF son las siglas en inglés de *Object Oriented MicroMagnetic Framework*, que es un proyecto de la *Applied and Computational Mathematics Division* (ACMD) de ITL/NIST, en estrecha colaboración con μ MAG, con el propósito de desarrollar programas y herramientas portables, extensibles y de dominio público para problemas que involucran la aproximación micromagnética. El programa está escrito usando el código C + + con una interface Tcl/Tk.

El Oxs (OOMMF extensible Solver) es un motor de cálculo micromagnético capaz de resolver problemas en redes tridimensionales con celdas rectangulares que contienen espines tridimensionales. Existen dos interfases para Oxs:

- La interfaz interactiva Oxsii, destinada a ser controlada principalmente a través de una interfaz gráfica de usuario.
- Modo por loteo Boxsi, que ha sido extendida para ser controlada por líneas de comando, lo que es adecuado para su uso en scripts por la terminal.

La simulación es una construcción de pasos llamados **Oxs Ext**, los cuales están organizados en ocho categorías: atlases, meshes, energies, evolvers, drivers, scalar field objects, vector field objects, y MIF support classes. Estas categorías deben ser consideradas dentro del archivo con extensión MIF que permite *correr* un programa (por ejemplo, simulacion.mif).

Atlases Lo primero que consideramos para realizar una simulación son los volúmenes geométricos especificados en **Oxs** mediante distintos tipos de atlas, los que dividen los dominios en uno o más subconjuntos llamados regiones. El atlas más utilizado es el **Oxs BoxAtlas**. Por otro lado, para combinar múltiples atlas debemos utilizar **Oxs MultiAtlas**. A continuación se nombran los distintos tipos de **Oxs Atlas** que podemos utilizar al momento de realizar una simulación:

- Oxs BoxAtlas.
- Oxs MultiAtlas
- Oxs EllipsoidAtlas
- Oxs ImageAtlas
- Oxs ScriptAtlas

Meshes Define la discretización del atlas en la simulación. La única malla disponible en la actualidad es:

Oxs RectangularMesh

Esto crea una malla rectangular a través de todo el espacio cubierto por el atlas. Las frecuencias de muestreo de malla a lo largo de cada eje se especifican por tamaño de celda (en metros).

Energies La siguiente lista son todos los tipos de **Oxs Energies** que podemos utilizar al momento de realizar una simulación:

- Oxs CubicAnisotropy
- Oxs Exchange6Ngbr
- Oxs FixedZeeman
- Oxs ScriptUZeeman
- Oxs StageZeeman
- Oxs TwoSurfaceExchange
- Oxs UniformExchange
- Oxs Demag
- Oxs ExchangePtwise
- Oxs RandomSiteExchange
- Oxs SimpleDemag

- Oxs TransformZeeman
- Oxs UniaxialAnisotropy
- Oxs UZeeman

Evolvers Los evolvers son responsables de actualizar la configuración de la magnetización de un paso al siguiente. Hay dos tipos de evolvers: *evolvers de tiempo*, que rastrean la dinámica de Landau-Lifshitz-Gilbert, y *evolvers de minimización*, que localizan los mínimos locales en la superficie de energía a través de técnicas de minimización directa. Los **evolvers** están controlados por los **drivers**, que veremos a continuación, y deben coincidir con el tipo de drivers adecuado, es decir, *evolvers de tiempo* deben estar vinculados con los *drivers de tiempo*, y *evolvers de minimización* deben estar vinculados con los *drivers de tiempo*, y *evolvers de minimización* de magnetización a los evolvers con una solicitud para avanzar en la configuración de un solo paso (también llamado una iteración). Actualmente hay tres evolvers de tiempo y un evolver de minimización en la distribución estándar de OOMMF:

- Oxs CGEvolve (minimización)
- Oxs RungeKuttaEvolve (tiempo)
- Oxs EulerEvolve (tiempo)
- Oxs SpinXferEvolve (tiempo)

Drivers Mientras que los evolvers vistos en la sección anterior son responsables de mover la simulación en pasos individuales, los drivers coordinan la acción de los evolvers en la simulación en su conjunto, mediante la agrupación de pasos en los TASKS (tareas), STAGES (etapas) y RUN (corriendo). Es el papel de los drivers, y no de los evolvers, determinar cuando una etapa de simulación o ejecución es completa. Los TASKS son pequeños grupos de pasos que se pueden completar sin afectar negativamente a la interfaz de usuario de respuesta. STAGES son unidades más grandes especificadas por la descripción del problema MIF; en particular, no se espera que los parámetros del problema cambien de forma discontinua dentro de un STAGE. RUN es la secuencia completa de los STAGES, de un problema de principio a fin. El Driver detecta cuando STAGES y RUN han terminado, según los criterios especificados en la descripción del problema en el archivo MIF, y pueden imponer restricciones. Hay dos Drivers en Oxs, *Oxs TimeDriver* para controlar evolvers de tiempo como *Oxs RungeKuttaEvolve* y *Oxs MinDriver* para controlar evolvers de minimización como *Oxs CGEvolve*:

- Oxs MinDriver
- Oxs TimeDriver

Field objects (Objetos de campo) devuelven valores (ya sea escalar o vectorial) en función de la posición. Estos se utilizan con frecuencia como objetos incrustados dentro de los *Specify blocks* (bloques específicos) de otros objetos **Oxs Ext** para iniciar cantidades variables espacialmente, tales como los parámetros del material o configuraciones iniciales de magnetización. Las unidades en los valores devueltos dependen del contexto en que se utilizan:

- Oxs AtlasVectorField
- Oxs PlaneRandomVectorField
- Oxs ScriptVectorField
- Oxs ScriptOrientVectorField
- Oxs AffineTransformVectorField
- Oxs ImageVectorField
- Oxs FileVectorField
- Oxs RandomVectorField
- Oxs UniformVectorField
- Oxs AffineOrientVectorField
- Oxs MaskVectorField

Mif support classes El objeto **Oxs LabelValue** hace referencia a través del campo en atributos estándares en otros bloques específicos, como por ejemplo *Oxs Evolvers*. Es en este bloque especifico donde agregamos la constante de amortiguamiento (α) y el tamaño de la iteración que realiza el cambio máximo en la magnetización normalizada (start dm):

Oxs LabelValue

Una vez insertadas todas las categorías en el archivo MIF, el programa evoluciona al sistema y calcula paso a paso la configuración de la magnetización que disminuye la energía hasta que el torque sea menor que un cierto valor (valor manejable) en cada punto del sistema.

Capítulo 3

Propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo como función de sus parámetros geométricos

En este capítulo mostraremos las simulaciones micromagnéticas que hemos realizado para investigar los procesos de reversión de la magnetización de una nanoestructura cilíndrica multisegmentada con segmentos de hilos y tubos magnéticos. Nos enfocaremos en el comportamiento de la coercividad y remanencia, concluyendo que cambiando la geometría de estas nanoestructuras nos permite controlar sus propiedades magnéticas. Además, analizaremos las condiciones geométricas que nos permitan estabilizar una configuración magnética antiparalela (es decir, la magnetización en los segmentos tubo e hilo apuntan en direcciones opuestas, nucleando así una pared de dominio entre los dos segmentos).

3.1. Simulación micromagnética

En este capítulo investigamos las curvas de histéresis para sistemas cilíndricos multisegmentados que alternan segmentos de hilos y tubos magnéticos usando el simulador micromagnético OOMMF [18]. Como hemos mencionado anteriormente, nos centramos en nanoestructuras definidas por su radio externo y su radio interno, R y a, respectivamente, y el largo total, L, que incluye el segmento hilo (de largo h) así como el segmento tubo (de largo L - h). Además, es conveniente definir la relación $\beta = a/R$, de manera que $\beta = 0$ representa un cilindro sólido, mientras que $\beta \rightarrow 1$ corresponde a un tubo magnético muy delgado. Además, definimos $\eta = h/L$, de modo que un tubo magnético está representado por $\eta = 0$, mientras que un sistema cilíndrico multisegmentado por $\eta \neq 0$, como se muestra en la figura 3.1.



Figura 3.1: Caracterización geométrica de nanoestructuras investigadas. De izquierda a derecha tenemos un nanohilo, un nanotubo, un sistema multisegmentado y la tapa superior de un nanotubo [100].

Para realizar las simulaciones micromagnéticas consideramos nanoestructuras aisladas de níquel (Ni) definidas por L = 800 nm (hemos simulado $\eta = 0$ y $\eta = 0.5$), con R variando entre 15 y 50 nm. Además, hemos variado β desde 0 hasta 0.9 en pasos de 0.1. Para simular Ni hemos considerado un acoplamiento de intercambio $A = 9 \times 10^{-12}$ J/m y una magnetización de saturación $M_s = 4.8 \times 10^5$ A/m. Como estamos interesados en muestras policristalinas, la anisotropía será muy pequeña y puede, por lo tanto, ser despreciada. Para nuestras simulaciones consideramos celdas cúbicas de tamaño $1 \times 1 \times 10$ nm³. Como estamos simulando nanoestructuras muy largas, hemos escogido un tamaño de celda suficientemente grande a lo largo del eje de la nanoestructura para finalizar la simulación en un tiempo razonable, pero lo suficientemente pequeña en el plano xy para reproducir su geometría cilíndrica. Finalmente, para todas las simulaciones hemos considerado un amortiguamiento (damping) constante de $\alpha = 0.5$.

3.2. Resultados y discusión

3.2.1. Curvas de histéresis

Comenzamos la investigación del rol de la geometría sobre la coercividad y la remanencia de las curvas de histéresis para L = 800 nm, variando R entre 15 y 50 nm, y con diferentes valores de β cuando el campo magnético es aplicado paralelo al eje z, ver fig. 3.1. Las figuras 3.2, 3.3 y 3.4 muestran resultados para un nanotubo magnético (arriba) y para una nanoestructura multisegmentada (abajo) con un radio de R = 15, 25 y 50 nm, respectivamente, para diferentes valores de β , desde $\beta = 0$, que representa un nanohilo magnético, hasta $\beta = 0.8$, que corresponde a un nanotubo magnético delgado. A partir de estas figuras podemos observar que, como se esperaba, debido a su anisotropía de forma, los nanotubos magnéticos revierten su magnetización a través de un único salto de Barkhausen [109]. Los saltos de Barkhausen definen un brusco cambio discontinuo de la magnetización. Vemos además que si aumentamos el radio del nanotubo, disminuye su coercividad y las curvas de histéresis comienzan su reversión más suavemente, pero siempre a través de un único salto Barkhausen.

Por otro lado, para el caso de una nanoestructura hilo/tubo con R = 15 nm nuevamente observamos un único salto de Barkhausen, similar al observado para el caso de un nanotubo. Sin embargo, si aumentamos el radio externo en 10 nanómetros, como nos muestra la figura 3.3 de radio R = 25 nm, podemos notar la presencia de dos saltos de Barkhausen bien definidos. Este comportamiento nos lleva a considerar dos nano-objetos diferentes con campos específicos de reversión para cada segmento. Así, podemos esperar que en el escalón observado en la curva de histéresis tengamos una configuración magnética antiparalela, donde la magnetización del segmento hilo apunta en una dirección, mientras que la magnetización del segmento tubo apunta en la dirección opuesta, formando así una pared de dominio entre los dos segmentos. Es interesante destacar que este comportamiento único ocurre para una geometría bien definida, ya que si aumentamos el radio externo a R = 50 nm observamos, en la figura 3.4, que las curvas de histéresis comienzan su reversión suavemente, pero siempre a través de un único salto Barkhausen.

3.2.2. Mecanismos de reversión de la magnetización

Para entender mejor el comportamiento observado en las curvas de histéresis, mostramos en la figura 3.3(b) el escalón de la curva de histéresis para una nanoestructura segmentada



Figura 3.2: Curvas de histéresis para L = 800 nm, R = 15 nm y distintos valores de β cuando el campo magnético es aplicado paralelo al eje z. La figura muestra resultados para (a) nanotubos magnéticos con $\eta = 0$ y para (b) nanoestructuras multisegmentadas con $\eta = 0.5$ [100].

hilo/tubo con L = 800 nm, R = 25 nm, $\eta = 0.5$ y $\beta = 0.6$. Vamos a considerar el caso particular cuando tenemos un campo externo de -80 mT. La nucleación y propagación de la pared es monitoreada por el valor de $\overline{m_i}(z) = \overline{M_i}(z)/M_s$, que es el valor promedio de la componente de los momentos magnéticos para la posición *z* relativa al valor de saturación [37]. La posición de la pared de dominio está determinada por el máximo de $(1 - |\overline{m_z}|)$ y se muestra en la figura 3.5(a). La linea punteada representa el promedio de la componente axial de la magnetización ($\overline{m_z}$), mientras que las otras dos componentes (en el plano) están dadas por las líneas sólidas y discontinuas. Cuando tanto $\overline{m_x}$ como $\overline{m_y}$ promedian cero, lo que ocurre cuando el modo de reversión es la nucleación y propagación de un vórtice, donde los espines en rotación permanecen tangentes a la pared de



Figura 3.3: Curvas de histéresis para L = 800 nm, R = 25 nm y distintos valores de β cuando el campo magnético es aplicado paralelo al eje z. La figura muestra resultados para (a) nanotubos magnéticos con $\eta = 0$ y para (b) nanoestructuras multisegmentadas con $\eta = 0.5$ [100].

dominio. Cuando una o ambas de estas componentes son distintas de cero, obtenemos un modo de reversión tipo transversal. De la figura 3.5(a) podemos concluir que los escalones en la curva de histéresis aparecen debido a que sólo ha revertido su magnetización el tubo, produciendo una pared de dominio tipo vórtice entre los segmentos tubos e hilos (ver la figura 3.5(b)). Debemos tener en cuenta que para distintos valores de β es posible obtener escalones en las curvas de histéresis debido a que una pared de dominio tipo vórtice queda anclada entre ambos segmentos.



Figura 3.4: Curvas de histéresis para L = 800 nm, R = 50 nm y distintos valores de β cuando el campo magnético es aplicado paralelo al eje z. La figura muestra resultados para (a) nanotubos magnéticos con $\eta = 0$ y para (b) nanoestructuras multisegmentadas con $\eta = 0.5$ [100].

3.2.3. Propiedades magnéticas: coercividad y remanencia

En la Figura 3.6 resumimos nuestros resultados mostrando el fuerte impacto de la geometría. En la Figura 3.6(a) presentamos la coercividad como función de los parámetros geométricos. A medida que aumentamos el diámetro de nuestras nanoestructuras (tanto del nanotubo como del sistema multisegmentado), la coercividad decrece [11, 110]. Basado en la figura 3 de la referencia [37] notamos que los nanotubos de Ni con $R \ge 25$ nm revierten su magnetización mediante la nucleación y propagación de una pared tipo vórtice. Esto significa que a medida que aumenta el agujero de los nanotubos, la coercividad decrece monotónicamente. Sin embargo, el nanotubo con R = 15 nm y $\beta \le 0.4$ revierte su magnetización a través de una pared tipo trans-



Figura 3.5: (a) Valor promedio de las componentes de los momentos magnéticos para la posición z relativa al valor de saturación y (b) sección transversal de la partícula mostrando que la pared de dominio es de tipo vórtice. En la figura 3.5(a) la abscisa representa el eje coordenado z a lo largo el hilo y las ordenadas dan las componentes promedios de la magnetización. $\overline{m_x}$: línea sólida (negra); $\overline{m_y}$: línea discontinua (roja); $\overline{m_z}$: línea punteada (azul) [100].

versal, resultando en un incremento en la coercividad del nanotubo a medida que aumentamos el agujero. Una vez que el agujero es lo suficientemente grande (con $\beta \ge 0.4$), el sistema revierte su magnetización a través de una pared tipo vórtice, produciendo así una disminución en la coercividad. Esto explica el máximo observado para el caso de los nanotubos con R = 15 nm.

Además, podemos notar que para pequeños valores de β (R = 15 nm, $\beta \le 0.1$; R = 25 nm, $\beta \le 0.2$ y R = 50 nm, $\beta \le 0.6$) los sistemas multisegmentados tienen la misma coercividad obtenida que para los nanotubos. Es importante también señalar que para el sistema multisegmentado con R = 15 nm observamos una disminución continua de la coercividad como función

de β . Esto se debe a que el segmento hilo revierte su magnetización a través de una pared tipo transversal; sin embargo, el segmento tubo comienza con una pared tipo transversal y luego, a medida que aumentamos el agujero del tubo, se convierte en una pared tipo vórtice.



Figura 3.6: (a) Coercividad y (b) remanencia para nanotubos ($\eta = 0$) y nanoestructuras multisegmentadas ($\eta = 0,5$) con diferentes radios (R = 15, 25 y 50 nm) como función de β [100].

Los sistemas multisegmentados con radios $R \ge 25$ nm, siempre revierten su magnetización a través de una pared tipo vórtice. Así el comportamiento no monotónico de la coercividad como función del agujero del tubo se debe a otras circunstancias. En estos casos, a medida que aumentamos el tamaño del agujero del tubo, aparece un escalón en la curva de histéresis (ver la figura 3.3(b)). Cuando este escalón alcanza una magnitud cercana a los 10 mT, la coercividad aumenta. Así, un mínimo de coercividad ocurre para ciertos valores de β ($\beta = 0.3$ para R = 25 nm y $\beta = 0.5$ para R = 50 nm).

Por otro lado, en la Figura 3.6(b) presentamos la remanencia como función de los parámetros geométricos de las nanoestructuras. Notamos que para radios menores o iguales a 25 nm, la remanencia es muy cercana a 1, independiente de la nanoestructura con la cual estemos trabajando (nanotubos o sistemas multisegmentados). Esta es una clara indicación de que las nanoestructuras revierten su magnetización en forma abrupta, dando lugar a curvas de histéresis cuadradas. Sin embargo, para una partícula de radio 50 nm, la remanencia comienza a disminuir, lo que nos indica que las curvas de histéresis tienen una forma redondeada, que es una indicación de la formación de paredes tipo vórtice en los extremos de las nanoestructuras [111, 112, 113].

3.2.4. Tamaño del escalón (configuración antiparalela)

Finalmente dirigimos nuestra atención a los escalones que aparecen en las curvas de histéresis como función de los parámetros geométricos de sistemas multisegmentados (ver la Figura 3.7). Es importante señalar que para todo el rango de parámetros investigados, estos escalones no han sido observados en los nanotubos. Además, el ancho de los escalones presenta un comportamiento no monotónico como función del radio de los sistemas multisegmentados. Así, nanoestructuras de 25 nm de radio exhiben la condición óptima (máximo ancho del escalón) para atrapar una pared de dominio o para generar una configuración magnética antiparalela dentro de la misma estructura. Adicionalmente, parece ser que este escalón ocurre sólo para radios entre 25-50 nm cuando $\beta \ge 0.2$. Luego, el escalón experimenta un crecimiento continuo hasta $\beta = 0.7$, a partir de donde el ancho del escalón satura. Es importante destacar que el ancho del escalón para la condición óptima alcanza los 60 mT, de modo que la distribución de coercividad en un arreglo (debido a que las nanoestructuras no son iguales) y las interacciones magnetostáticas que puedan existir entre ellas, no afecta realmente la posibilidad de estabilizar una pared de dominio entre el segmento hilo y el segmento tubo (y así generar una configuración magnética antiparalela).

3.3. Conclusión

Hemos investigado numéricamente las curvas de histéresis para nanotubos y nanoestructuras multisegmentadas de níquel no interactuantes como función de sus geometrías. Los resul-



Figura 3.7: Ancho de los escalones en las curvas de histéresis para los mismos parámetros geométricos definidos en la Figura 3.6. Es importante señalar que tanto para los nanotubos de R = 15, 25 y 50 nm, así como para las nanoestructuras multisegmentadas con R = 15 nm, el ancho de los escalones es cero independientemente de β [100].

tados presentados anteriormente muestran que la coercividad y la remanencia son fuertemente afectadas por los parámetros geométricos de las nanoestructuras. A medida que aumentamos el radio de las nanoestructuras (ya sea el nanotubo o el sistema multisegmentado), la coercividad disminuye. Es importante notar también que, para los sistemas multisegmentados con R = 15nm, observamos una disminución de la coercividad como función de β . Sin embargo, esto no es cierto para radios mayores donde la coercividad experimenta un comportamiento no monotónico presentando una coercividad mínima para un cierto valor de β . Además, notamos que para radios menores o iguales a 25 nm, la remanencia es cercana a 1, y para radios de 50 nm, la remanencia comienza a disminuir, lo que indica una forma redondeada en la curva de histéresis.

Por otro lado, notamos que los nanotubos magnéticos revierten su magnetización a través de un único salto de Barkhausen. Sin embargo, a medida que aumentamos el tamaño del agujero del segmento tubo (aumentando el valor de β), el sistema multisegmentado presenta dos saltos de Barkhausen bien definidos, generando un escalón en la curva de histéresis. Estos escalones aparecen debido a que sólo el segmento tubo ha revertido su magnetización, anclando una pared de dominio tipo vórtice entre los segmentos tubos e hilos. Nanoestructuras multisegmentadas de 25 nm de radio exhiben la condición optima (con un máximo ancho de escalón de 60 mT) para

atrapar una pared de dominio o para generar una configuración magnética antiparalela dentro de la misma estructura. De este modo, podemos preparar una configuración magnética antiparalela, útil para encapsular pequeñas partículas magnéticas. Además, la posibilidad de generar una pared de dominio magnética estable en una nanoestructura cilíndica puede ser útil para la manipulación de paredes de dominio, un tópico de creciente interés debido a sus potenciales aplicaciones en espintrónica.

Capítulo 4

Dependencia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo

4.1. Introducción

En este capítulo vamos a realizar simulaciones micromagnéticas para investigar la dependencia angular de las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo. Nos enfocamos en el comportamiento de la coercividad H_c , magnetización remanente M_r y el ancho del escalón δH , concluyendo que cambiando el ángulo θ en el que se aplica el campo magnético externo nos permite controlar las propiedades magnéticas de nanoestructuras hilo/tubo. Así, estas nanoestructuras tienen un gran potencial para convertirse en bloques de construcción de dispositivos magnéticos avanzados.

4.2. Simulación micromagnética

Hemos investigado las curvas de histéresis para nanoestructuras hilo/tubo no interactuantes usando un simulador micromagnético [18]. Las propiedades magnéticas de estas nanoestructuras cambiarán como función de sus parámetros geométricos, así como del ángulo en que se aplique el campo magnético externo. En este capítulo hemos analizado tres casos (ver figura 4.1): un nanohilo, un nanotubo y una nanoestructura hilo/tubo. Todos los sistemas tienen un radio externo $R_{externo}$ de 15 nm, y las estructuras que contienen una sección tubular tienen un radio interno $R_{interno}$ de 12 nm. Usamos para todas las nanoestructuras un largo total de $L_{total} = 1 \ \mu$ m. La nanoestructura hilo/tubo tiene dos segmentos: un nanotubo y un nanohilo, que tienen la misma longitud, es decir, $L_{nanohilo} = L/2$. La razón $\beta = R_{interno}/R_{externo}$ está definida tal que $\beta = 0$ representa un cilindro sólido, mientras que $\beta \rightarrow 1$ corresponde a un tubo muy delgado. En nuestro caso particular, hemos usado $\beta = 0.8$. Además, definimos $\eta = L_{nanohilo}/L_{total}$ para describir las tres estructuras investigadas. Considerando este parámero adimensional podemos definir que cuando $\eta = 1$ la estructura investigada es un nanohilo, cuando $\eta = 0.5$ estamos trabajando con una nanoestructura hilo/tubo, mientras que cuando $\eta = 0$ estamos en presencia de un nanotubo aislado.



Figura 4.1: Caracterización geométrica de un nanohilo (izquierda), un nanotubo (centro), y una nanoestructura hilo/tubo (derecha) [101].

Hemos usado para las nanoestructuras de $Ni_{80}Fe_{20}$ una magnetización de saturación de $M_s = 796 \times 10^3 \text{ Am}^{-1}$ y una constante de intercambio de $A = 13 \times 10^{-12} \text{ Jm}^{-1}$. Consideramos muestras policristalinas, por lo que no consideramos la anisotropía magnetocristalina. Para nuestras simulaciones hemos considerado celdas de tamaño de $1.5 \times 1.5 \times 5 \text{ nm}^3$, que es menor que la longitud de intercambio para el Permaloy definida por $l_{ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2} = 5.71$ nm. Finalmente, para todas las simulaciones hemos considerado una constante de amortiguamiento (damping) de $\alpha = 0.5$.
4.3. Resultados y discusión

La figura 4.2 muestra las curvas de histéresis de un nanohilo (a), una nanoestructura hilo/tubo (b) y un nanotubo (c) como función del ángulo θ en que el campo magnético externo es aplicado. A partir de esta figura, observamos que las curvas de histéresis de las tres nanoestructuras investigadas son similares, independientemente del ángulo en que se aplica el campo magnético externo. La única diferencia notable se produce cuando el campo magnético externo es aplicado a lo largo del eje de las nanoestructuras ($\theta = 0^{\circ}$), donde tanto el nanohilo como el nanotubo revierten su magnetización a través de un único salto de Barkhausen. Sin embargo, a partir de la curva de histéresis de la nanoestructura hilo/tubo, observamos dos saltos de Barkhausen definiendo así un escalón en la curva de histéresis. Este escalón tiene su origen en que el segmento tubo revierte su magnetización primero, y luego el segmento hilo, formando así una configuración magnética antiparalela entre los segmentos que componen la nanoestructura cilíndrica (ver figura 4.4).

4.3.1. Propiedades magnéticas: coercividad y remanencia

La figura 4.3(a) muestra la coercividad como función del ángulo θ en el que el campo externo es aplicado. A partir de este gráfico podemos ver que no hay diferencias significativas en el comportamiento de la coercividad si trabajamos con un nanohilo, una nanoestructura hilo/tubo o un nanotubo. De hecho, en los tres casos obtenemos un comportamiento no monotónico, indicando así la existencia de un cambio en el modo de reversión de la magnetización de la nanoestructura como función del ángulo θ . El comportamiento observado es similar al medido previamente en nanohilos magnéticos [53] y en nanotubos [56, 57]. Finalmente, cabe destacar que la coercividad de un nanohilo es siempre mayor que la coercividad de un nanotubo, independientemente del ángulo en que se aplique el campo magnético externo.

A partir de la figura 4.3(b) podemos ver que la remanencia sigue la función $M_r(\theta) = M_r cos^2(\theta)$, con $M_r = M_r(\theta = 0)$ la remanencia medida para $\theta = 0^\circ$. Este comportamiento es esperado debido a la alta relación de aspecto de las nanoestructuras investigadas. Finalmente, es importante señalar que nuestros resultados para la remanencia de un nanohilo, una nanoestructura hilo/tubo, y un nanotubo coinciden. Además, mientras que para un comportamiento histerético la reversión de la magnetización ocurre mediante la nucleación y propagación de paredes de dominio, para $\theta = 90^\circ$ se observa una reversión cuasi-coherente (ver la figura 4.5), originando el comportamiento anhisterético observado. Este efecto también se evidencia en la fuerte disminu-



Figura 4.2: Curvas de histéresis para un nanohilo (a), una nanoestructura hilo/tubo (b), y un nanotubo (c) como función del ángulo θ en que se aplica el campo magnético externo [101].

ción de la remanencia.

4.3.2. Tamaño del escalón como función del ángulo

Hasta ahora hemos visto que la principal diferencia entre una nanoestructura hilo/tubo con respecto a los nanohilos y nanotubos magnéticos es la aparición de un escalón en la curva de histéresis. Este escalón indica la aparición de una configuración magnética antiparalela dentro



Figura 4.3: Comparación directa entre la dependencia angular del campo coercitivo (a) y la remanencia (b) para un nanohilo (cuadrados negros), una nanoestructura hilo/tubo (triángulos azules), y un nanotubo (circulos rojos). Cuando $\theta = 0^{\circ}$ el eje *z* del hilo-tubo es paralelo al campo aplicado y para $\theta = 90^{\circ}$ es perpendicular. (c) Dependencia angular del ancho del escalón para una nanoestructura hilo/tubo [101].

de la nanoestructura cilíndrica, que ha sido propuesta como capaz de retener partículas dentro de los nanotubos multisegmentados debido a los campos magnéticos generados por esta configuración [90, 91]. Cabe destacar que esta configuración surge debido a que el segmento tubo revierte su magnetización antes que el segmento hilo (ver figura 4.4). A partir de la figura 4.3(c) observamos como el ancho del escalón disminuye a medida que aumenta el ángulo en el que se aplica el campo magnético externo. Se observa además que el ancho del escalón alcanza su máximo (cerca de 120 mT) para $\theta = 0^{\circ}$, y éste desaparece completamente para ángulos mayores que $\theta = 25^{\circ}$. Esto significa que la nanoestructura hilo/tubo presenta condiciones óptimas para preparar una configuración magnética antiparalela (para potenciales aplicaciones), siempre y cuando el campo magnético externo sea aplicado en un ángulo cercano al eje principal de la nanoestructura.

4.3.3. Mecanismos de reversión de la magnetización

Con el fin de investigar en más detalle los mecanismos de reversión de la magnetización de estas nanoestructuras hilo/tubo, vamos a mostrar imágenes tomadas desde las curvas de histéresis medidas para $\theta = 0^{\circ}$ (ver figura 4.4) y $\theta = 90^{\circ}$ (ver figura 4.5). La nucleación y propagación de una pared de dominio (si hay alguna) es monitoreada por los valores de $\bar{m}_i(z) = \bar{M}_i(z)/M_s$, el valor promedio de la componente del momento magnético para la posición z relativa al valor de saturación. Así, la posición de la pared de dominio se determina por el máximo de $(1 - |\bar{m}_z|)$. La línea negra representa la componente axial promedio de la magnetización (\bar{m}_z) mientras que las otras dos componentes (en el plano) están dadas por las líneas rojas (\bar{m}_y) y azules (\bar{m}_x) .

A partir de la figura 4.4 podemos ver que para $\theta = 0^{\circ}$, el sistema comienza a revertir la magnetización del segmento tubo cuando se aplica un campo cercano a 144 mT. Como m_x y m_y son cercanos a cero, esto implica que el modo de reversión de la magnetización corresponde a una pared de dominio tipo vórtice. Después de eso, el sistema encuentra una configuración magnética antiparalela estable (donde el segmento tubo apunta en una dirección, mientras que el segmento hilo apunta en la dirección opuesta) que se mantiene hasta los -264 mT. Es decir, el ancho del escalón alcanza 120 mT, un ancho bastante significativo para su uso en potenciales aplicaciones. Una vez que se aplica un campo de -264 mT, el sistema comienza a revertir el segmento hilo. Curiosamente, la pared de dominio anclada en el centro de la nanoestructura hilo/tubo permanece en su posición, y el segmento hilo comienza a revertir su magnetización a través del otro extremo de la nanoestructura. En este caso, las componentes m_x y m_y son distintas de cero, indicando que el segmento hilo revierte su magnetización mediante la nucleación y propagación de una pared de dominio transversal. Así, usando nanoestructuras cilíndricas fuímos capaces de revertir la magnetización de cada segmento independientemente, a través de la nucleación y propagación de diferentes paredes de dominio. Además, somos capaces de generar una configuración magnética antiparalela bastante estable.

Finalmente, a partir de la figura 4.5 es posible ver qué ocurre cuando cambiamos el ángulo del campo magnético externo aplicado. En particular, observamos una reversión cuasi-coherente de la magnetización cuando $\theta = 90^{\circ}$, un mecanismo de reversión completamente diferente al observado en la figura 4.4. Esta rotación cuasi-coherente es responsable del comportamiento anti-histerético observado en la figura 4.2.

4.4. Conclusión

En conclusión, hemos realizado una comparación sistemática de la dependencia angular de las propiedades magnéticas de nanohilos, nanotubos y nanoestructuras hilo/tubo. Observamos que ni la coercividad ni la remanencia cambian drásticamente si trabajamos con nanohilos, nanotubos o sistemas hilo-tubo. La coercividad tiene un comportamiento no-monotónico indicando un cambio en el modo de reversión de la magnetización como función del ángulo en que se aplica el campo magnético externo. De hecho, se observa la nucleación y propagación de las paredes de dominio (pared de dominio tipo vórtice para nanotubos y pared de dominio tipo transversal para nanohilos) para ángulos pequeños, mientras que para ángulos grandes se observa una rotación cuasi-coherente. Esto significa que la curva de histéresis de la nanoestructura compleja revierte su magnetización independientemente. En este estudio hemos cuantificado el ancho del escalón, así como su comportamiento con el ángulo θ . De hecho, hemos observado que este escalón es máximo para $\theta = 0^{o}$ y desaparece para ángulos mayores que 25^{o} . Finalmente, es posible preparar una configuración magnética antiparalela, lo que podría conducir a numerosas aplicaciones.



Figura 4.4: Valor promedio de la componente del momento magnético para la posición *z* relativa al valor de saturación para $\theta = 0^{\circ}$. La abscisa representa la coordenada axial, *z*, a lo largo de la nanoestructura hilo/tubo y las ordenadas dan las componentes promedio de la magnetización. \bar{m}_x : línea segmentada (azul); \bar{m}_y : línea segmentada-punteada (rojo); \bar{m}_z : línea punteada (negro) [101].



Figura 4.5: Valor promedio de la componente del momento magnético para la posición *z* relativa al valor de saturación para $\theta = 90^{\circ}$. La abscisa representa la coordenada axial, *z*, a lo largo de la nanoestructura hilo/tubo y las ordenadas dan las componentes promedio de la magnetización. \bar{m}_x : línea segmentada (azul); \bar{m}_y : línea segmentada-punteada (rojo); \bar{m}_z : línea punteada (negro) [101].

Capítulo 5

Interacción magnetostática entre nanoestructuras hilo/tubo

5.1. Introducción

En este capítulo hemos realizado simulaciones micromagnéticas para investigar las interacciones magnetostáticas entre nanoestructuras hilo/tubo (ver Figura 5.1(a)). Nos centramos en sus propiedades magnéticas, concluyendo que el cambio de la distancia entre las nanoestructuras hilo/tubo nos permite controlar sus propiedades magnéticas. Finalmente, encontramos que el escalón que aparece en la curva de histéresis, que define una configuración magnética antiparalela de los dominios magnéticos, desaparece para los sistemas altamente interactuantes. Por lo tanto, es importante considerar el efecto de las interacciones magnetostáticas cuando se utilizan estas nanoestructuras para potenciales aplicaciones.

5.2. Simulación micromagnética

Realizamos simulaciones numéricas para un arreglo de nanoestructuras hilo/tubo sintetizado mediante electrodeposición en membranas de alúmina porosa [59]. Esta técnica de fabricación produce arreglos hexagonales de nanoestructuras con ordenamiento de largo alcance. Tratar de simular un arreglo de tamaño experimental sin aproximaciones no es posible debido a la gran cantidad de nanoestructuras que lo componen. Con el fin de obtener información sobre el proceso de reversión de la magntización teniendo en cuenta la interacción con las nanoestructuras vecinas y, al mismo tiempo, utilizar un tiempo de cálculo razonable, hemos estudiado mediante simulaciones micromagnéticas [18] una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo (ver la Figura 5.1(b)), tal y como fue propuesto previamente por Bahiana *et al.* [114] para un arreglo de nanohilos magnéticos interactuantes.

La descripción geométrica de las estructuras simuladas se muestra en la Figura 5.1(a), donde la nanoestructura hilo/tubo presenta dos segmentos: un nanotubo y un nanohilo, con la misma longitud, es decir, $L_1 = L_2 = 500$ nm, de modo que el largo total de la nanoestructura es de 1 μ m. La nanoestructura tiene un diámetro externo de d = 30 nm, y la sección tubular tiene un diámetro interno de $\delta = 24$ nm. La figura 5.1(b) muestra la vista superior de la celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo separadas unas de otras por una distancia centro-a-centro D. En este capítulo consideramos tres casos: D = d = 30 nm, D = 2d = 60 nm y $D \rightarrow \infty$ (correspondiente a un sistema aislado).



Figura 5.1: (a) Caracterización geométrica de una nanoestructura hilo/tubo. (b) Vista superior de una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo.

Hemos usado para las nanoestructuras de Ni₈₁Fe₁₉ una magnetización de saturación de $M_s = 796 \times 10^3$ A m⁻¹ y una constante de intercambio de $A = 13 \times 10^{-12}$ J m⁻¹. Consideramos que la muestra es policristalina, por lo tanto no consideraremos la anisotropía magnetocristalina en nuestras muestras. Para las simulaciones hemos considerado celdas de $2 \times 2 \times 5$ nm³, menores que la longitud de intercambio del material permaloy definido por $l_{ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2} = 5,71$ nm.

Finalmente en todas nuestras simulaciones hemos considerado un amortiguamiento (damping) constante de $\alpha = 0.5$.

5.3. Resultados y discusión

5.3.1. Curvas de histéresis

La figura 5.2 muestra las curvas de histéresis para una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo separadas entre sí por una distancia (a) D = d, (b) D = 2d, y (c) $D \rightarrow \infty$ (nanoestructuras aisladas) como función del ángulo θ en el cual se aplica el campo magnético externo. A partir de la curva de histéresis de una nanoestructura hilo/tubo aislada (Figura 5.2(c)) con $\theta = 0^{\circ}$, obtenemos dos saltos de Barkhausen definiendo un escalón en la curva de histéresis. Este escalón se origina debido a que el segmento tubo revierte su magnetización primero que el segmento hilo, formando así una configuración magnética antiparalela entre los segmentos que componen la nanoestructura cilíndrica [100, 58, 101]. La dependencia angular del ancho del escalón para una nanoestructura aislada ya ha sido investigada previamente [101], donde se demostró que el escalón decae abruptamente desde 120 mT ($\theta = 0^{\circ}$) a cero ($\theta = 30^{\circ}$) como función del ángulo θ .

Por otro lado, a medida que se reduce la distancia entre las nanoestructuras, el arreglo se hace más interactuante, reduciendo así su coercividad para todos los ángulos considerados. Adicionalmente, se observa que cuando se aplica el campo magnético externo a lo largo del eje de la nanoestructura ($\theta = 0^{o}$), los dos saltos de Barkhausen observados para $D \rightarrow \infty$ (ver la Figura 5.2(c)), dan lugar a varios saltos de Barkhausen menores (ver la Figura 5.2(b)), que se explicarán más adelante (ver la Figura 5.3). Finalmente, para el caso más interactuante, es decir, para D = d se observa un único salto de Barkhausen. Por otro lado, es interesante observar que para $\theta = 90^{o}$, los tres casos investigados muestran un comportamiento anhisterético que se atribuye a una reversión cuasi-coherente de los momentos magnéticos en cada estructura cilíndrica presente en el arreglo.



Figura 5.2: Curvas de histéresis para una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo separadas entre sí por una distancia centro-a-centro (a) D = d, (b) D = 2d, y (c) $D \rightarrow \infty$ como función del ángulo θ en el que se aplica el campo magnético externo.

5.3.2. Mecanismos de reversión de la magnetización

Con el fin de investigar en más detalle el mecanismo de reversión de la magnetización de un arreglo de nanoestructuras hilo/tubo, en la figura 5.3 mostramos imgenes para cada uno de los saltos de Barkhausen obtenidos a partir de la curva de histéresis simulada para D = 2d

y $\theta = 0^{\circ}$. Hemos visto que en la curva de histéresis de una nanoestructura aislada aparece un escalón debido a que el tubo revierte su magnetización antes que el segmento hilo (ver la Figura 5.2(c)). Sin embargo, cuando tenemos un arreglo de nanoestructuras que interactúan débilmente, el segmento tubo de la nanoestructura ubicado en el centro del arreglo revierte su magnetización primero. Esto produce el primer salto de Barkhausen en la curva de histéresis de los arreglos (ver punto (1) en la Figura 5.3). El hecho de que el sistema comience a revertir su magnetización desde el centro del arreglo es completamente esperado, teniendo en cuenta que esta nanoestructura central está siendo sometida a una mayor interacción magnetostática. El segundo salto de Barkhausen se produce debido a la reversión de la magnetización de los segmentos tubos pertenecientes a las nanoestructuras vecinas a la nanoestructura central, formando así una línea recta con esta última (ver punto (2) en la Figura 5.3). La formación de esta línea recta para la reversión de la magnetización es común en arreglos hexagonales [115]. El tercer salto de Barkhausen produce la reversión de la magnetización de todos los segmentos tubos y de dos segmentos hilos (ver punto (3) en la Figura 5.3). El cuarto salto provoca la reversión de la magnetización de otro segmento hilo, mientras que el quinto salto produce la reversión de otros dos. Es en este momento donde se produce el escalón más grande (ver punto (5) en la Figura 5.3). Finalmente, un sexto salto de Barkhausen produce la reversión de la magnetización de todas las nanoestructuras.

5.3.3. Propiedades magnéticas: coercividad y remanencia

La Figura 5.4(a) muestra la coercividad como función del ángulo θ en el que se aplica el campo magnético externo. A partir de esta figura observamos que una disminución de la distancia entre las nanoestructuras (aumentando el efecto de las interacciones magnetostáticas entre ellas), disminuye la coercividad del arreglo, independientemente del ángulo en el que se aplica el campo magnético externo. Además, para los tres casos investigados se obtiene un comportamiento no monótono, indicando así la existencia de un cambio en el modo de reversión de las nanoestructuraras como función de θ [101]. Es importante destacar que el ángulo θ en que se obtiene la máxima coercividad varía como función de la distancia D entre las nanoestructuras, concluyendo así que el cambio de la distancia centro-a-centro nos permite controlar las propiedades magnéticas de estas nanoestructuras hilo/tubo.

A partir de la figura 5.4(b) podemos ver que la remanencia sigue la función $M_r(\theta) = M_r cos^2(\theta)$, con $M_r = M_r(\theta = 0)$ la remanencia medida para $\theta = 0^o$. Este comportamiento es esperado debido a la gran razón de aspecto de las nanoestructuras investigadas. Finalmente, es



Figura 5.3: Imágenes de las configuraciones magnéticas estables obtenidas a partir de los escalones presentes en la curva de histéresis para D = 2d y $\theta = 0^{\circ}$. Las imágenes son enumeradas desde 1 a 5, números que se correlacionan con los escalones de la curva de histéresis mostrada abajo de las imágenes.

importante señalar que la remanencias obtenidas para arreglos con diferentes distancias D entre las nanoestructuras, coinciden. Además, se observa una reversión cuasi-coherente (ver la figura 5.2) para $\theta = 90^{\circ}$, independientemente de la separación entre las nanoestructuras, originando así el comportamiento anhisterético observado. Este efecto también se pone de manifiesto en la fuerte disminución en la remanencia.



Figura 5.4: (a) Coercividad y (b) remanencia para una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo separadas entre ellas por una distancia centro-a-centro D = d (línea sólida roja), D = 2d (línea segmentada azul), y $D \rightarrow \infty$ (línea punteada negra) como función del ángulo θ en el cual se aplica el campo magnético externo.

5.4. Conclusión

En conclusión, hemos investigado una celda hexagonal con siete nanoestructuras hilo/tubo separadas entre sí por una distancia centro-a-centro D = d, D = 2d, y $D \rightarrow \infty$ como función del ángulo θ en el que se aplica el campo magnético externo. Observamos que una disminución de la distancia entre las nanoestructuras (aumentando el efecto de las interacciones magnetostáticas entre ellas), disminuye la coercividad del arreglo, independientemente del ángulo en el que se aplique el campo magnético externo. Además, se observa que cuando se aplica el campo magnético externo a lo largo del eje de las nanoestructuras ($\theta = 0^o$), los dos saltos de Barkhausen observados para $D \rightarrow \infty$ dan lugar a varios saltos de Barkhausen menores para D = 2d, los que se convierten en un único salto de Barkhausen para el caso más interactuante, es decir, para D = d. Adicionalmente, para los tres casos investigados se obtuvo un comportamiento no monotónico de la coercividad, lo que indica la existencia de un cambio en el modo de reversión de las nanoestructuras como función de θ . Es importante destacar que el ángulo θ en que se obtiene la máxima coercividad varía como función de la distancia entre las nanoestructuras, concluyendo así que el cambio de la distancia centro-a-centro nos permite controlar las propiedades magnéticas de las nanoestructuras hilo/tubo. Finalmente, es importante señalar que las remanencias obtenidas para los arreglos con diferentes distancias entre las nanoestructuras coinciden. Además, para $\theta = 90^{\circ}$ se observa una reversión cuasi-coherente responsable del comportamiento anhisterético observado. El estudio de las interacciones magnetostáticas en arreglos de nanoestructuras hilo/tubo es un tema interesante debido a sus potenciales aplicaciones tecnológicas, donde por lo general es deseable evitar dichas interacciones o al menos controlarlas.

Capítulo 6

Conclusión y perspectivas

6.1. Conclusión general

Durante los últimos años se han investigado intensamente las propiedades magnéticas de nanohilos y nanotubos magnéticos. Estas nanoestructuras anisotrópicas pueden ser usadas para aumentar la densidad de almacenamiento de información más allá del límite superparamagnético, debido a que la geometría de estas nanoestructuras produce una anisotropía uniaxial (anisotropía de forma) sobre ellas (la magnetización preferirá alinearse a lo largo del eje de la nanoestructura). Sin embargo, pudiésemos aumentar aún más la densidad de información si una sola nanoestructura se divide en segmentos. De esta forma, las nanoestructuras multisegmentadas mantienen las extraordinarias propiedades de los hilos y tubos, pero adicionalmente presentan otras nuevas, las que incluso pueden llevarnos a insospechadas potenciales aplicaciones [60].

Es bien sabido que una nanoestructura pseudo-unidimensional, como un nanohilo o nanotubo, revierte su magnetización a través de la nucleación de paredes de dominio en los extremos de la nanoestructura. Luego estas paredes de dominio (que pueden ser tipo vórtice o transversal) se propagan a lo largo de la nanoestructura hasta colapsar una con la otra en el centro de ésta. En general, este proceso de reversión produce curvas de histéresis cuadradas (con un único salto de Barkhausen). Por el contrario, en esta tesis hemos visto que las nanoestructuras multisegmentadas exhiben como función de sus parámetros geométricos, material, ángulo en que se aplica el campo externo e interacciones entre las nanoestructuras, curvas de histéresis con un único salto, dos saltos, o múltiples saltos de Barkhausen. La explicación a esta variedad es la siguiente:

Si el segmento tubo es similar al segmento hilo (es decir, el tamaño del agujero del tubo,

caracterizado por β , es muy pequeño), entonces la nanoestructura continuará nucleando paredes de dominio en los extremos de la nanoestructura. Estas paredes serán del mismo tipo en ambos extremos y se propagarán hacia el centro de la nanoestructura. De esta forma, el sistema invertirá su magnetización a través de un único salto de Barkhausen.

- Si el segmento tubo es diferente al segmento hilo (es decir, el tamaño del agujero del tubo, caracterizado por β, es grande), entonces el segmento tubo invertirá su magnetización antes que el segmento hilo. Lo que ocurre es lo siguiente: el tubo nucleará una pared de dominio tipo vórtice en el extremo libre del tubo, pared que se propagará a través del tubo y se detendrá en la interfase que se produce entre el segmento hilo y el segmento tubo. De esta forma, el proceso de reversión ocurrirá a través de dos saltos de Barkhausen, generando un escalón en la curva de histéresis. El escalón define una configuración magnética antiparalela, donde el segmento tubo ha revertido su magnetización, mientras que el segmento hilo no, formando así una pared de dominio tipo vórtice entre ambos segmentos.
- Si tomamos el caso anterior, es decir, donde el segmento tubo es diferente al segmento hilo, esperamos una curva de histéresis con dos saltos de Barkhausen los que definen un escalón. Sin embargo, hasta ahora hemos considerado una nanoestructura aislada. Si consideramos un arreglo de nanoestructuras interactuantes, el campo sentido por cada segmento será diferente y dependerá de la magnetización de los otros segmentos. De esta forma, esperamos que los segmentos inviertan su magnetización para diferentes campos, generando de esta forma múltiples saltos de Barkhausen.

Finalmente, hemos visto que la configuración magnética antiparalela es muy apetecible ya que puede ser usada para retener durante un tiempo mayor, en comparación a otras configuraciones magnéticas, una nanopartícula magnética en el interior del segmento tubo [90, 91], o para controlar el movimiento de una pared de dominio magnética [60]. Esta configuración magnética aparece en el escalón de la curva de histéresis de una nanoestructura hilo/tubo. A lo largo de esta tesis hemos investigado la condición óptima para obtener esta configuración antiparalela (o el escalón en la curva de histéresis) y nuestra recomendación para un experimental que busca medir este escalón es considerar nanoestructuras de Permalloy con un radio de 15 nm, $\beta = 0.8$, donde las nanoestructuras estén lo más separadas posible, y que el campo magnético externo se aplique en un ángulo inferior a 30° con respecto al eje de la nanoestructura.

6.2. Perspectivas

Hasta ahora hemos variado el material, el radio externo e interno de las nanoestructuras multisegmentadas, el ángulo en que se aplica el campo externo y la distancia entre las nanoestructuras. Nos falta investigar el efecto de las longitudes, es decir, la longitud de cada segmento, y la longitud total de la nanoestructura. Para llevar a cabo esta investigación estamos colaborando con el **Instituto Jozef Stefan** de Eslovenia, quienes han sido capaces de sintetizar nanoestructuraras multisegmentadas de Co-Pt. Sólo estamos a la espera de que finalicen algunas simulaciones para poder comparar nuestros resultados con los obtenidos experimentalmente.

Nuestra idea es que esta tesis pueda ser el puntapié inicial para el estudio en profundidad de estas nanoestructuras. Como mencionamos anteriormente, recién en noviembre de 2014 apareció el primer artículo donde se logró sintetizar estas nanoestructuras hilo/tubo en forma experimental [59]. Creemos que utilizando las técnicas de electrodeposición y de deposición de capas atómicas sobre membranas de alúmina porosa, los próximos años aparecerán nuevos estudios sobre la síntesis y caracterización de arreglos de estas nanoestructuras. Además, nuevos estudios han propuesto utilizar estas nanoestructuras como potenciales nanotransistores magnéticos [60].

Apéndice A

Simulaciones micromagnéticas en detalle

Para realizar una simulación micromagnética en OOMMF debemos preparar un archivo de extensión MIF (por ejemplo, simulación1.mif) que contenga las categorías descritas en el capitulo 2.2.6 de esta tesis. Pensar estos archivos es gran parte del trabajo realizado durante mi trabajo de tesis. De esta forma, y para dar una comprensión más clara de lo aquí desarrollado, procederé a presentar y explicar los archivos MIF utilizados en esta tesis.

A.1. Simulación 1 en extenso

A continuación pasamos a detallar las simulaciones utilizadas en el capítulo 3, las que permiten investigar una nanoestructura hilo/tubo sometida a un campo magnético externo aplicado a lo largo del eje principal de la nanoestructura, es decir, el eje z. La simulación se realizó variando el radio externo entre 15 y 50 nm, el largo total de la nanoestructura L, y los parámetros adimensionales $\beta = R_{interno}/R_{externo}$ y $\eta = h/L$. Vamos a explicar cada una de las líneas exhibidas en las figuras A.1 y A.2:

- set pi y set mu0 son un par de constantes numéricas que serán utilizadas en la simulación.
- Oxs_BoxAtlas es un bloque específico de Atlas, donde se describe el tamaño de la estructura en las tres coordenadas cartesianas. En nuestro caso hemos definido que x e y tienen una extensión entre 0 y 50 nm, mientras que z va desde 0 a 800 nm.

- Oxs_RectangularMesh es un bloque específico de Mesh y define el tamaño de la celda en los tres ejes coordenados del atlas definido anteriormente. En nuestro caso usamos una celda de 2 × 2 × 10 nm³.
- Oxs_UniformExchange es un bloque específico de Energies que considera una energía de intercambio uniforme en todo el espacio definida por la constante de intercambio A, la que varía para cada material. En nuestro caso hemos simulado nanoestructuras de níquel, por lo que A = 9 × 10⁻¹² J/m.
- Oxs_Demag es un bloque específico de Energies que considera una energía de desmagnetización estándar, que se basa en la suposición de que la magnetización es constante en cada celda.
- Oxs_UZeeman es un bloque específico de Energies que considera la energía de un campo aplicado uniforme. Este término se utiliza para simular ciclos de histéresis definiendo el número de pasos en la simulación. En nuestro caso hemos considerado que el campo externo aplicado a la nanoestructura va desde 150 a -150 mT, a través de 1000 pasos.
- $Oxs_EulerEvolve$ es un bloque específico de Energies, donde la evolución del tiempo es implementado mediante el método progresivo de Euler a primer orden con el control del tamaño de pasos en la ecuación diferencial de Landau-Lifshitz. Para ejecutar este bloque es necesario definir los términos de amortiguamiento ($\alpha = 0,5$) y el tamaño de la iteración que realiza el cambio máximo en la magnetización normalizada (start dm 0.01).
- Oxs_TimeDriver es un bloque específico de Drivers para controlar los evolucionadores de tiempo. Los primeros cuatro parámetros, Evolver, Mesh, Ms y m0 proporcionan referencias en: evolucionador de tiempo, una celda, un campo escalar y un campo vectorial, respectivamente. Aquí Ms es la magnetización de saturación, en nuestro caso $M_s = 4.8 \times 10^5$ A/m y m0 es la configuración inicial de la magnetización de espines unitarios, es decir, |m| = 1 en cada punto, en este caso en la dirección [001]. Por lo tanto, se requiere de estos cuatro parámetros, tal como se observa en la figura A.2.
- Proc Ring Define un proceso dado. En nuestro caso lo utilizamos para describir la estructura cilíndrica. Además, es posible describir un tubo fijando las condiciones, como por ejemplo: si el radio es mayor que 1 y si es menor a 0.6, no considere esas celdas como material magnético, sino como vacío.

```
# MIF 2.1
# Sample problem description for a isolated wire-tube multisegmented
set pi [expr 4*atan(1.0)]
set mu0 [expr 4*$pi*1e-7]
Specify Oxs_BoxAtlas:atlas {
 xrange {0 50e-9}
 yrange {0 50e-9}
 zrange {0 800e-9}}
Specify Oxs_RectangularMesh:mesh {
 cellsize {2e-9 2e-9 10e-9}
 atlas :atlas}
# Exchange
Specify Oxs_UniformExchange {
 A 9e-12}
# Demag
Specify Oxs_Demag {}
#Zeeman
Specify Oxs_UZeeman {
    multiplier 795.77472
     Hrange {
         {0 0 150 0 0 -150 1000}
                      } }
# Evolver
Specify Oxs_EulerEvolve {
 alpha 0.5
 start_dm 0.01}
```

Figura A.1: Segmento del archivo MIF donde se define el tamaño de la nanoestructura, el tamaño de la celda, la constante de intercambio, el campo externo aplicado, y algunas constantes en la evolución temporal.

A.2. Simulación 2 en extenso

A continuación pasamos a detallar las simulaciones utilizadas en el capítulo 4, las que permiten investigar nanoestructuras cilíndricas como función del ángulo en que se aplica el campo magnético externo. Todos los sistemas exhiben un radio externo de $R_{externo} = 15$ nm, y las estructuras que contienen una sección tubular presentan un radio interno de $R_{interno} = 12$ nm. Usamos para todas las nanoestructuras un largo total de $L_{total} = 1$ µm. Las nanoestructuras hilo/tubo presentan dos segmentos: un nanotubo y un nanohilo, que tienen la misma longitud, es decir, $L_{nanohilo} = L_{nanotubo} = L/2$. Además, hemos variado el campo externo desde $\theta = 0^{o}$ hasta $\theta = 90^{o}$. Vamos a explicar cada una de las líneas exhibidas en las figuras A.3 y A.4:

Parameter Theta 00 es la dirección del campo externo aplicado sobre la nanoestructura.
 Este parámetro se utiliza luego en Set Field.

```
# Driver
Specify Oxs_TimeDriver {
evolver Oxs_EulerEvolve
stopping_dm_dt 0.01
mesh :mesh
stage_count 1001
stage_iteration_limit 0
total_iteration_limit 0
Ms { 0xs_ScriptScalarField {
   atlas :atlas
   script {Ring 480e3}
} }
m0 { Oxs_UniformVectorField {
   norm 1
   vector {0 0 1}
proc Ring { Ms x y z } {
   set xrad [expr 2.*$x-1 ]
   set yrad [expr 2.*$y-1 ]
   set zrad [expr 2.*$z-1]
   set test [expr sqrt($xrad*$xrad+$yrad*$yrad)]
if {$test>1.0 || $z>0.5 && $test<0.6} {return 0}
   return $Ms}
```



- set pi y set mu0 son un par de constantes numéricas que serán utilizadas en la simulación.
- Set ModCamp Define el campo de saturación para el arreglo y el campo inicial del ciclo de histéresis de la simulación.
- Set Fieldz Define la dirección del campo externo aplicado en la componente z, del mismo modo Set Fieldx en x. Aquí utilizamos el parámetro Theta.
- Set kt Define el vector unitario en la componente z, del mismo modo que Set it en x.
- Oxs_BoxAtlas es un bloque específico de Atlas, donde se describe el tamaño de la estructura en las tres coordenadas cartesianas. En nuestro caso hemos definido que x e y tienen una extensión entre 0 y 30 nm, mientras que z va desde 0 a 1000 nm.
- Oxs_RectangularMesh es un bloque específico de Mesh y define el tamaño de la celda en los tres ejes coordenados del atlas definido anteriormente. En nuestro caso usamos una celda de 1,5 × 1,5 × 10 nm³.
- Oxs_UniformExchange es un bloque específico de Energies que considera una energía de intercambio uniforme en todo el espacio definida por la constante de intercambio A, la que

varía para cada material. En nuestro caso hemos simulado nanoestructuras de Ni_{80} Fe_{20} , por lo que $A = 13 \times 10^{-12}$ J/m.

- Oxs_Demag es un bloque específico de Energies que considera una energía de desmagnetización estándar, que se basa en la suposición de que la magnetización es constante en cada celda.
- Oxs_UZeeman es un bloque específico de Energies que considera la energía de un campo aplicado uniforme. Este término se utiliza para simular ciclos de histéresis definiendo el número de pasos en la simulación.

```
# MIF 2.1
# Sample problem description for angular dependence a wire-tube multisegmented B 0.8
Parameter Theta 00; # Angle in degrees
set pi [expr 4*atan(1.0)]
set mu0 [expr 4*$pi*1e-7]
set ModCamp [expr {2000}]; # H[mt]
set FieldZ [expr {$ModCamp*cos($Theta*$pi/180.)}]
set FieldX [expr {$ModCamp*sin($Theta*$pi/180.)}]
set kt [expr {cos($Theta*$pi/180.)}]
set it [expr {sin($Theta*$pi/180.)}]
Specify Oxs_BoxAtlas:atlas {
                     xrange {0 30e-9}
                     yrange {0 30e-9}
                     zrange {0 1000e-9}}
Specify Oxs_RectangularMesh:mesh {
 cellsize {1.5e-9 1.5e-9 5e-9}
 atlas :atlas}
Specify Oxs_UniformExchange {
 A 13e-12}
Specify Oxs_Demag {}
Specify Oxs_UZeeman [subst {
     multiplier 795.77472
     Hranae {
     {$FieldX 0 $FieldZ -$FieldX 0 -$FieldZ 1000} } }]
```

Figura A.3: Segmento del archivo MIF donde se define el tamaño de la nanoestructura, el tamaño de la celda, la constante de intercambio, el campo externo aplicado, y algunas constantes en la evolución temporal.

• Oxs_EulerEvolve es un bloque específico de Energies, donde la evolución del tiempo es implementado mediante el método progresivo de Euler a primer orden con el control del tamaño de pasos en la ecuación diferencial de Landau-Lifshitz. Para ejecutar este bloque es necesario definir los términos de amortiguamiento (α = 0,5) y el tamaño de la iteración que realiza el cambio máximo en la magnetización normalizada (start dm 0.01).

- Dxs_TimeDriver es un bloque específico de Drivers para controlar los Evolvers de tiempo en la simulación. Los primeros cuatro parámetros, Evolver, Mesh, Ms y m0 proporcionan referencias en: evolucionador de tiempo, una celda, un campo escalar y un campo vectorial, respectivamente. Aquí Ms es la magnetización de saturación medida en A/m, y m0 es la configuración inicial de la magnetización de espines unitarios, es decir, |m| = 1 en cada punto. Por lo tanto, se requiere estos cuatro parámetros, tal como se observa en la figura A.4.
- Proc Ring Define un proceso dado. En nuestro caso lo utilizamos para describir la estructura cilíndrica. Además es posible describir un tubo fijando las condiciones, como por ejemplo: si el radio es mayor que 1 y si es menor a 0.8, no considere esas celdas como material magnético, sino como vacío.

```
Specify Oxs_EulerEvolve {
  alpha 0.5
  start_dm 0.01}
Specify Oxs_TimeDriver [subst {
     evolver Oxs_EulerEvolve
     stopping_dm_dt 0.01
     mesh :mesh
     stage_count 1001
     stage_iteration_limit 0
     total_iteration_limit 0
     Ms { 0xs_ScriptScalarField {
     atlas :atlas
     script {atlas 796e3}} }
m0 {Oxs_UniformVectorField {
     vector {$it 0 $kt}
     norm 1
}}]]
proc atlas { Ms x y z } {
    set xrad [expr 2.*$x-1 ]
    set yrad [expr 2.*$y-1 ]
    set zrad [expr 2.*$z-1]
    set test [expr sqrt($xrad*$xrad+$yrad*$yrad)]
if {$test>1.0 || $z>0.5 && $test<0.8} {return 0}
    return $Ms}
```

Figura A.4: Segmento del archivo MIF donde se define la estructura cilíndrica y tubular de la nanoestructura.

A.3. Simulación 3 en extenso

Para comenzar nuestra simulación debemos definir qué tipo de archivo MIF vamos a emplear. Como se observa en la figura A.5 para nuestro caso será MIF 2.1. Luego comenzamos

a definir los parámetros que queremos utilizar.

- Parameter Theta 60 es la dirección del campo externo aplicado sobre la nanoestructura.
 Este parámetro se utiliza luego en Set Field.
- set pi y set mu0 son un par de constantes numéricas que serán utilizadas en la simulación.
- Parameter xrange Define el tamaño de cada partícula en el eje x de coordenadas.
- Set ModCamp Define el campo de saturación para el arreglo y el campo inicial de la simulación.
- Set Fieldz Define el campo externo aplicado en la componente z, del mismo modo Set Fieldx en x.
- Set kt Define el vector unitario en la componente z, del mismo modo Set it en x.
- Proc wirtub Define un proceso dado, en nuestro caso lo utilizamos para describir una estructura cilíndrica, dando las condiciones en caso que no lo sea. Además es posible describir un tubo fijando las condiciones de un determinado radio.
- Oxs_Multiatlas es un bloque específico Atlas y se construye como una lista ordenada de otros atlas, tal como se observa en la figura A.6, llamados wiretub1, wiretub2 y wiretub3, etc.
- Oxs_RectangularMesh es un bloque específico de Mesh y define el tamaño de celda en los tres ejes coordenados del atlas definido anteriormente, tal como se observa en la figura A.7.
- Oxs_UniformExchange es un bloque específico de Energies, es uniforme en todo el espacio, y define la constante de intercambio A, la que varía para cada material y se mide en J/m.
- Oxs_Demag es un bloque específico de Energies, es el término de energía de desmagnetización estándar, que se basa en la suposición que la magnetización es constante en cada celda.
- Oxs_UZeeman es un bloque específico de Energies, es el término de energía de campo uniforme aplicado. Utilizado para simular ciclos de histéresis definiendo el número de pasos en la simulación.

MIF 2.1 # nano wires/tubes in hexagonal array s 60 Parameter Theta 60; # Angle in degrees set pi [expr 4*atan(1.0)] set mu0 [expr 4*\$pi*1e-7] Parameter xrange 30e-9 30e-9 Parameter yrange Parameter zrange 1000e-9 set ModCamp [expr {2000}]; # H[mt] set FieldZ [expr {\$ModCamp*cos(\$Theta*\$pi/180.)}] set FieldX [expr {\$ModCamp*sin(\$Theta*\$pi/180.)}] set kt [expr {cos(\$Theta*\$pi/180.)}] set it [expr {sin(\$Theta*\$pi/180.)}] proc wirtub { x y z } { set xrad [expr 2.*\$x-1] set yrad [expr 2.*\$y-1] set radi [expr sqrt(\$xrad*\$xrad+\$yrad*\$yrad)] if {\$radi>1.0 || \$radi<0.8 && \$z>0.5} {return 0} return 1

Figura A.5: Segmento del archivo MIF donde se define la dirección del campo externo aplicado, constantes numéricas, parámetros geométricos y un proceso específico.

- Oxs_EulerEvolve es un bloque específico de Energies, donde la evolución del tiempo es implementado por el método progresivo de Euler sencillo a primer orden con el control del tamaño de pasos en la ecuación diferencial de Landau-Lifshitz. Para ejecutar este bloque es necesario definir los términos de amortiguamiento (α) y el tamaño de la iteración que realiza el cambio máximo en la magnetización normalizada (start dm).
- Oxs_TimeDriver es un bloque específico de Drivers para controlar los evolucionadores de tiempo. Los primeros cuatro parámetros, Evolver, Mesh, Ms y m0 proporcionan referencias en: evolucionador de tiempo, una celda, un campo escalar y un campo vectorial, respectivamente. Aquí Ms es la magnetización de saturación medida en A/m, y m0 es la configuración inicial de la magnetización de espines unitarios, es decir, |m| = 1 en cada punto. Por lo tanto, se requiere estos cuatro parámetros, tal como se observa en la figura A.8.
- Destinatión archive es utilizado para guardar la tabla de datos definidas por defecto según el numero de Stage.

```
Specify Oxs_MultiAtlas:atlas {
atlas { 0xs_ScriptAtlas:wirtub1 {
xrange {30e-9 60e-9}
yrange {0 30e-9}
zrange {0 1000e-9}
regions {wt}
script wirtub
}}
atlas {0xs_ScriptAtlas:wirtub2 {
xrange {90e-9 120e-9}
yrange {0 30e-9}
zrange {0 1000e-9}
regions {wt}
script wirtub
}}
atlas {0xs_ScriptAtlas:wirtub3 {
xrange {0 30e-9}
yrange {52e-9 82e-9}
zrange {0 1000e-9}
regions {wt}
script wirtub
}}
```

Figura A.6: Segmento del archivo MIF donde se define la posición de cada nanoestructura mediante un bloque específico multiatlas, utilizando el proceso antes descrito.

```
Specify Oxs_RectangularMesh:mesh [subst {
  cellsize {2e-9 2e-9 5e-9}
  atlas :atlas
}]
# Exchange
Specify Oxs_UniformExchange {
  Α
      13e-12
}
# Demag
Specify Oxs_Demag {}
#Zeeman
Specify Oxs_UZeeman [subst {
     multiplier 795.77472
     Hrange {
         {$FieldX 0 $FieldZ -$FieldX 0 -$FieldZ 1000}
} }]
# Evolver
Specify Oxs_EulerEvolve {
  alpha 0.5
  start_dm 0.01
```

Figura A.7: Segmento del archivo MIF donde se define el tamaño de la celda, las energías involucradas, y las constantes en la ecuación de Landau-Lifshitz.

```
# Driver
Specify Oxs_TimeDriver [subst {
 evolver Oxs_EulerEvolve
 stopping_dm_dt 0.01
 mesh :mesh
 stage_count 1001
 stage_iteration_limit 0
 total_iteration_limit 0
 Ms { 0xs_AtlasScalarField {
    atlas :atlas
default_value 0
values {
   wt 796e3
}
}
}
 m0 { 0xs_UniformVectorField {
    vector {$it 0 $kt}
    norm 1
31
Destination archive mmArchive
Schedule DataTable archive Stage 1
Schedule Oxs_TimeDriver::Magnetization archive Stage 1
```

Figura A.8: Segmento del archivo MIF donde se definen los Drivers necesarios en el bloque específico de Evolvers, como la magnetización inicial, valor de la magnetización de saturación del material medido en A/m. Además, se fija el número de archivos descritos en el problema.

Bibliografía

- [1] X. Duan, Y. Huang, R. Agarwal, C. M. Lieber, Nature 421, 241 (2003).
- [2] Y. Xia, P. Yang, Y. Sun, B. Mayers, B. Gates, Y. Yin, F. Kim, Y. Han, Adv. Mater. 15, 353 (2003).
- [3] S. J. Son, J. Reichel, B. He, M. Schushman, S. B. Lee, J. Am. Chem. Soc. 127, 7316 (2005).
- [4] K. Nielsch, F. J. Castaño, S. Matthias, W. Lee, C. A. Ross, Adv. Eng. Mater. 7, 217, (2005).
- [5] Z. K. Wang et al., Phys. Rev. Lett. 94, 137208 (2005).
- [6] F. Tao, M. Guan, Y. Jiang, J. Zhu, Z. Xu, Z. Xue, Adv. Mater. (Weinheim, Ger). 18, 2161 (2006).
- [7] M. Eisenstein, Nat. Methods 2, 484 (2005).
- [8] Yu-Nu Hsu, Sangki Jeong, David E. Laughlin, David N. Lambeth, J. Magn. Magn. Mater. 260, 282-294 (2003).
- [9] H. Masuda, K. Fukuda, Science 268, 1466 (1995).
- [10] Del Atkinson, Dan A. Allwood, Gang Xiong, Michael D. Cooke, Colm C. Faulkner, Russell P. Cowburn, Nature Mater. 2, 85 (2003).
- [11] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, E. E. Vogel, P. Vargas, J. Magn. Magn. Mater. 308, 233-237 (2007).
- [12] J. Escrig, S. Allende, D. Altbir, M. Bahiana, Appl. Phys. Lett. 93, 023101 (2008).
- [13] A. Pereira, J. C. Denardin, J. Escrig, J. Appl. Phys. 105, 083903 (2009).
- [14] C. Morales-Concha, M. Ossandon, A. Pereira, D. Altbir, J. Escrig, J. Appl. Phys. 111, 07D131 (2012).
- [15] Y. Velazquez-Galvan, J. M. Martinez-Huerta, J. de la Torre Medina, Y. Danlee, L. Piraux, A. Encinas, J. Phys.: Condens. Matter. 26, 026001 (2014).

- [16] M. Beleggia, S. Tandon, Y. Zhu, M. De Graef, J. Magn. Magn. Mater. 278, 270 (2004).
- [17] K. M. Lebeckia, O. Kazakovab, M.W. Gutowskia, Physica B 403, 360363 (2008).
- [18] M. J. Donahue, D. G. Porter, OOMMF User's Guide, Version 1.2a3, 2002. http://math.nist.gov/oommf.
- [19] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth, Phil. Trans. Roy. Soc. 240, 599-642 (1948). Reimpreso en IEEE Trans. Magn. 27, 3475-3518 (1991).
- [20] L. Neel, Ann. Geophys. 5, 99-135 (1949).
- [21] S. H. Charap, P. L. Lu and Y. He, IEEE Trans. Magn. 33, 978 (1997).
- [22] http://www.sony.net/SonyInfo/News/Press/201404/14-044E/index.html.
- [23] T. Ono, H. Miyajima, K. Shigeto, K. Mibu, N. Hosoito, T. Shinjo, Science 284, 468-470 (1999).
- [24] E. Saitoh, H. Miyajima, T. Yamaoka, G. Tatara, Nature 432, 203 (2004).
- [25] Claude Chappert, Thibaut Devolder, Nature 432, 162 (2004).
- [26] D. Allwood, G. Xiong, M. Cooke, C. Faulkner, D. Atkinson, N. Vernier R. Cowburn, Science 296, 20032006 (2002).
- [27] Peng Xu, Ke Xia, Changzhi Gu, Ling Tang, Haifang Yang, Junjie Li, Nature Nanotech. 3, 97-100 (2008).
- [28] D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, R. P. Cowburn, Science 309, 1688-1692 (2005).
- [29] S. S. P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas, Science 320, 190 (2008).
- [30] Ming Yan, Attila Kakay, Sebastian Gliga, Riccardo Hertel, Phys. Rev. Lett. 104, 057201 (2010).
- [31] G. S. D. Beach, C. Nistor, C. Knutson, M. Tsoi, J. L. Erskine, Nature Materials 4, 741-744 (2005).
- [32] D. Hinzke, U. Nowak, J. Magn. Magn. Mater. 221, 365-372 (2000).
- [33] H. Forster, T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, V. Tsiantos, R. Dittrich, J. Fidler, J. Appl. Phys. 91, 6914 (2002).

- [34] R. Wieser, U. Nowak, K. D. Usadel, Phys. Rev. B 69, 064401 (2004).
- [35] K. Nielsch, R. Hertel, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, U. Gosele, S. F. Fischer, H. Kronmuller, IEEE Trans. Magn. 38, 2571 (2002).
- [36] E. H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, Phys. Rev. 106, 446 (1957).
- [37] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir, E. E. Vogel, Appl. Phys. Lett. 90, 102501 (2007).
- [38] W. Wernsdorfer, B. Doubin, D. Mailly, K. Hasselbac, A. Benoit, J. Meier, J. P. Ansermet, B. Barbara, Phys. Rev. Lett. 77, 1873 (1996).
- [39] F. Elhoussine, S. Matefi-Tempfli, A. Encinas, L. Piraux, Appl. Phys. Lett. 81, 1681 (2002).
- [40] D. Neumaier, D. Vogl, J. Eroms, D. Weiss, Phys. Rev. B 78, 174424 (2008).
- [41] L. Sun, P. C. Searson, C. L. Chien, Appl. Phys. Lett. 74, 2803 (1999).
- [42] Q. F. Liu, C. X. Gao, J. J. Xiao, D. S. Xue, J. Magn. Magn. Mater. 260, 151 (2003).
- [43] S. W. Chung, J. Y. Yu, J. R. Heath, Appl. Phys. Lett. 76, 2068 (2000)
- [44] X. Duan, Y. Huang, Y. Cui, J. Wang, C. M. Lieber, Nature 409, 6669 (2001).
- [45] H. M. Huang, M. Mao, E. Weber, R. Russo, P. Yang, Science 292, 1897 (2001).
- [46] N. Gao, H. J. Wang, E. H. Yang, Nanotechnology 21, 105107 (2010).
- [47] E. Ferain, R. Legras, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 267, 1028 (2009).
- [48] S. J. Hurst, E. K. Payne, L. Qin, C. A. Mirkin, Angewandte Chemie International Edition 45, 2672-2692 (2006).
- [49] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, M. Bahiana, J. dÁlbuquerque e Castro, Appl. Phys. Lett. 89, 132501 (2006).
- [50] M. Albrecht, G. Hu, A. Moser, O. Hellwig, B. D. Terris, J. Appl. Phys. 97, 103910 (2005).
- [51] G. C. Han, B. Y. Zong, P. Luo, Y. H. Wu, J. Appl. Phys. 93, 9202 (2003).
- [52] R. Lavin, J. C. Denardin, J. Escrig, D. Altbir, A. Cortes, H. Gomez, J. Appl. Phys. 106, 103903 (2009).

- [53] R. Lavin, C. Gallardo, J. L. Palma, J. Escrig, J. C. Denardin, J. Magn. Magn. Mater. 324, 2360 (2012).
- [54] F. Tejo, N. Vidal-Silva, A. P. Espejo, J. Escrig, J. Appl. Phys. 115, 17D136 (2014).
- [55] J. Escrig, M. Daub, P. Landeros, K. Nielsch, D. Altbir, Nanotechnology 18, 445706 (2007).
- [56] S. Allende, J. Escrig, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana, Eur. Phys. J. B 66, 37-40 (2008).
- [57] O. Albrecht, R. Zierold, S. Allende, J. Escrig, C. Patzig, B. Rauschenbach, K. Nielsch, D. Goerlitz, J. Appl. Phys. 109, 093910 (2011).
- [58] R. F. Neumann, M. Bahiana, N. M. Vargas, D. Altbir, S. Allende, D. Gorlitz, Appl. Phys. Lett. 102, 202407 (2013).
- [59] Muhammad Shahid Arshad, Darja Pecko, Saso Sturm, Juan Escrig, Matej Komelj, Paul J. McGuiness, Spomenka Kobe, K. Zuzek Rozman, IEEE Trans. Magn. 50, 2302904 (2014).
- [60] A. P. Espejo, N. Vidal-Silva, J. A. Lopez-Lopez, D. Goerlitz, K. Nielsch, J. Escrig, Appl. Phys. Lett. 106, 132405 (2015).
- [61] S. lijima, Nature (London) 354, 56 (1991).
- [62] M. H. Dvoret, D. Esteve, C. Urbina, Nature 360, 547-553 (1992).
- [63] T. M. Whitney, J. S. Jiang, P. C. Searson, C. L. Chien, Science 261, 1316-1319 (1993).
- [64] L. Piraux, J. M. George, J. F. Despres, Ferain E. Leroy, R. Legras, K. Ounadjela, A. Fert, Appl. Phys. Lett. 65, 2484 (1994).
- [65] A. Fert, L. Piraux, J. Magn. Magn. Mater. 200, 338-358 (1999).
- [66] K. Liu, K. Nagodawithana, P. C. Searson, C. L. Chien, Phys. Rev. B 51, 7381 (1995).
- [67] H. P. Liang, Y. G. Guo, J. S. Hu, C. F. Zhu, L. J. Wan, C. L. Bai, Inorganic Chemistry 44, 3013 (2005).
- [68] L. Wang, K. Y. Zhang, A. Metrot, P. Bonhomme, M. Troyon, Thin Solid Films 288, 86 (1996).
- [69] M. Chen, P. C. Searson, J. Appl. Phys. 93, 8253-8255 (2003).
- [70] L. Clime, S. Y. Zhao, P. Chen, F. Normandin, H. Roberge, T. Veres, Nanotechnology 18, 435709 (2007).

- [71] Z. Song, Y. Xie, S. Yao, H. Wang, W. Zhang, Z. Tang, Materials Letters 65, 1562 (2011).
- [72] R. Sharif, X. Q. Zhang, M. K. Rahman, S. Shamaila, J. Y. Chen, X. F. Han, Y. K. Kim, IEEE Transactions on Magnetics 45, 4026-4033 (2009).
- [73] J. U. Cho, J. H. Min, S. P. Ko, J. Y. Soh, Y. K. Kim, J. Appl. Phys. 99, 08C909 (2006).
- [74] S. Dubois, S. Chassaing, J. L. Duvail, L. Piraux, M. G. Waals, Journal de Chimie Physique 96, 1316 (1999).
- [75] K. Y. Kok, C. M. Hangarter, B. Goldsmith, I. K. Ng , N. B. Saidin, N. V. Myung, J. Magn. Magn. Mater. 322, 3876 (2010).
- [76] X. T. Tang, G. C. Wang, M. Shima, J. Appl. Phys. 99, 123910 (2006).
- [77] X. T. Tang, G. C. Wang, M. Shima, Phys. Rev. B 75, 134404 (2007).
- [78] P. Shakya, B. Cox, D. Davis, J. Magn. Magn. Mater. 324, 453 (2011).
- [79] J. J. Park, M. Reddy, C. Mudivarthi, P. R. Downey, B. H. Stadler, A. B. Flatau, J. Appl. Phys. 107, 09A954 (2010).
- [80] Y. Peng, T. Cullis, G. Mobus, X. Xu, B. Inkson, Nanotechnology 18, 485704 (2007).
- [81] P. Panigrahi, R. Pati, Phys. Rev. B 76, 024431 (2007).
- [82] M. Elawayeb, Y. Peng, K. J. Briston, B. J. Inkson, J. Appl. Phys. 111, 034306 (2012).
- [83] S. Valizadeh, L. Hultman, J. M. George, P. Leisner, Advanced Functional Materials 12, 766 (2002).
- [84] K. Qi, X. Li, H. Zhang, L. Wang, D. Xue, H. Zhang, B. Zhou, N. J. Mellors, Y. Peng, Nanotechnology 23, 505707 (2012).
- [85] F. Nasirpouri, IEEE Transactions on Magnetics 47, 2015-2021 (2011).
- [86] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).
- [87] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys. Rev. B 39, 4828 (1988).
- [88] W.Lee, R. Sholz, K. Nielsch, U. Gosele, Angewandte Chemie International Edition 44, 6050-6054 (2005).

- [89] B. Leighton, O. J. Suarez, P. Landeros, J. Escrig, Nanotechnology 20, 385703 (2009).
- [90] R. F. Neumann, M. Bahiana, J. Escrig, S. Allende, K. Nielsch, D. Altbir, Appl. Phys. Lett. 98, 022502 (2011).
- [91] R. F. Neumann, M. Bahiana, S. Allende, J. Escrig, D. Altbir, J. Appl. Phys. 111, 013916 (2012).
- [92] J. H. Lee, S. N. Holmes, B. Hong, P. E. Roy, M. D. Mascaro, T. J. Hayward, D. Anderson, K. Cooper, G. A. C. Jones, M. E. Vickers, C. A. Ross, C. H. W. Barnes, Appl. Phys. Lett. 95, 172505 (2009).
- [93] S. S. P. Parkin, Scientific American Magazine 300, 76 (2009).
- [94] H. J. Fan, W. Lee, R. Hauschild, M. Alexe, G. Le Rhun, R. Scholz, A. Dadgar, K. Nielsch, H. Kalt, A. Krost, M. Zacharias, U. Gosele, Small 2, 561 (2006).
- [95] M. Bystrzejewski, H. Lange, A. Huczko, Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct. 15, 167 (2007).
- [96] D. B. Roa, I. D. Barcelos, A. de Siervo, K. R. Pirota, R. G. Lacerda, R. Magalhaes-Paniago, Appl. Phys. Lett. 96, 253114 (2010).
- [97] K. G. Kornev, D. Haverlson, G. Korneva, Y. Gogotsi, G. Friedman, Appl. Phys. Lett. 92, 233117 (2008).
- [98] J. Wang, J. Zhao, L. Ma, G. Wang, R. Bruce King, Nanotechnology 18, 235705 (2007).
- [99] K. Binder, D. W. Heermann. Simulation in statistical physics, New York: Springer (2002).
- [100] D. Salazar-Aravena, R. M. Corona, D. Goerlitz, K. Nielsch, J. Escrig. J. Magn. Magn. Mater. 346, 171-174 (2013).
- [101] D. Salazar-Aravena, J. L. Palma, J. Escrig, Materials Research Express 1, 026112 (2014).
- [102] D. Salazar-Aravena, J. L. Palma, J. Escrig, J. Appl. Phys. (en referato).
- [103] http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/solids/magpr.html
- [104] W. F. Brown Jr, Micromagnetics, Interscience Publishers (1963).
- [105] A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism, Oxford University Press (1996).

- [106] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Dynamics of Continuous Media, 2nd ed. Pergamon Press (1981).
- [107] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, 2nd ed. (Wiley, New York, 1975).
- [108] P. Weiss, J. de Phys. Theorique et Appliquee 6, 666-690 (1907).
- [109] H. Barkhausen, Physikalische Zeitschrift 20, 401-403 (1919).
- [110] P. Landeros, O. J. Suarez, A. Cuchillo, P. Vargas, Phys. Rev. B 79, 024404 (2009).
- [111] Ai-Ping Chen, Julian M. Gonzalez, Konstantine Y. Guslienko, J. Appl. Phys. 109, 073923 (2011).
- [112] A. P. Chen, J. Gonzalez, K. Y. Guslienko, J. Magn. Magn. Mater. 324, 3912-3917 (2012).
- [113] E. E. Vogel, P. Vargas, D. Altbir, J. Escrig, Magnetic nanotubes, in: K. D. Sattler (Ed.), Handbook of Nanophysics, vol. 4, CRC Press, 2010, pp. 1– 14.
- [114] M. Bahiana, F. S. Amaral, S. Allende, D. Altbir, Phys. Rev. B 74, 174412 (2006).
- [115] J. Escrig, D. Altbir, M. Jaafar, D. Navas, A. Asenjo, M. Vazquez, Phys. Rev. B 75, 184429 (2007).