

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURAS  
MAGNÉTICAS RECTANGULARES MEDIANTE  
SIMULACIONES DE MONTE CARLO

ROBERTO ALEJANDRO ESCOBAR DONOSO

Profesora Guía: Dra. Dora Altbir Drullinsky

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

Santiago - Chile

Agosto 2015

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURAS  
MAGNÉTICAS RECTANGULARES MEDIANTE  
SIMULACIONES DE MONTE CARLO

ROBERTO ALEJANDRO ESCOBAR DONOSO

Profesora Guía: Dra. Dora Altbir Drullinsky  
Profesores Comisión: Dr. Juliano Casagrande Denardin  
Dr. Juan Escrig  
Dr. Fernando Méndez  
Dr. Alvaro Núñez  
Dr. Eugenio Vogel

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

Santiago - Chile

Agosto 2015

**CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURAS  
MAGNÉTICAS RECTANGULARES MEDIANTE  
SIMULACIONES DE MONTE CARLO**

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 - Chile

Agosto 2015

**CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURAS  
MAGNÉTICAS RECTANGULARES MEDIANTE  
SIMULACIONES DE MONTE CARLO**

Este trabajo de Graduación fue preparado bajo la supervisión de la profesora guía Dra. Dora Altbir Drullinsky, 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 Drullinsky .....

Dr. Juliano Casagrande Denardin .....

Dr. Juan Escrig .....

Dr. Fernando Méndez .....

Dr. Alvaro Núñez .....

Dr. Eugenio Vogel .....

.....

Directora Departamento de Física

© **Roberto Escobar Donoso**, 2015

Se autoriza la reproducción parcial o total de esta obra, con fines académicos, por cualquier forma, medio o procedimiento, siempre y cuando se incluya la cita bibliográfica del documento.

# Dedicatoria

---

"Dedicado a Pascal, mis padres y hermanos."

# Agradecimientos

---

En primer lugar deseo agradecer profundamente a mi tutora, la doctora Dora Altbir Drullinsky por la gran confianza brindada desde el primer momento, tanto para la propuesta, el desarrollo y la conclusión de este trabajo. Gracias por su apoyo, sus sabios y pertinentes consejos y las múltiples enseñanzas entregadas durante mi formación.

También quisiera agradecer a mi familia, por el constante apoyo y el incansable afecto entregado. A mis padres Roberto y Maida, a mis hermanos Esteban y Nicole y a quién se ha portado como un padre, el “dostor” Fernando. Es el ejemplo de todos ellos y las enseñanzas del “dostor” lo que me permitió llegar a este punto.

Durante estos años de estudio he forjado grandes amistades, ya sea en el ambiente universitario o fuera de él. Estos lazos son tan importantes que no importa el tiempo ni la distancia, el contacto continúa firme como el primer día. Es por esto que quiero agradecer a mis amigos Marlen Gutierrez, Patricia Días, Carlos Ponce, Álvaro Espejo, Nicolás Vargas, Sebastián Castillo y Rosa Corona. Espero y confío en que cumplirán cada meta que se propongan. De manera especial también destacar la compañía, amistad y apoyo de mis compañeros de oficina Nicolás vidal y Felipe Tejo. Además a William Montes y Tania Silva, Johanna García y Héctor Piñol, Michelle Hervé, Renato Toro, Amalia Lagos, Fatima Toro, y aunque nunca va a leer este texto quiero incluir a “Luthier”, una mascota con un gran corazón.

Agradezco también a los profesores José d'Albuquerque e Castro, Mónica Bahiana, Sebastian Allende y Caroline Ross, que han formado parte importante tanto en el desarrollo de esta tesis como en lo personal. Gracias por las discusiones, experiencias y enseñanzas tanto de física como de la vida. Quiero también incluir a quienes han aportado tanto a mi formación como a la de muchos integrantes del grupo de magnetismo hoy, ellos son los profesores Juan Escrig, Juliano Denardin, Eugenio Vogel, Alvaro Núñez y David Laroze (perdón si me olvidé de alguno).

Como parte de mi proceso de formación tuve la fortuna de conocer personas buenas de distintos países, con quienes compartí parte de mi vida. Muchas gracias Enno, Lara, Wubin, Ho Pin y Paula por ser personas de alegría y paz. Tengo muy buenos recuerdos a los que siempre recurriré con emoción.

Si bien la ciencia es importante, todo el trabajo que hay detrás de una charla o congreso, por ejemplo, es llevado a cabo de forma silenciosa pero no menos importante. Muchas gracias a Erika Inostroza, Carmen Olivares, Armando Jaque y Andrea Caniullan por la ayuda que siempre nos brindan.

También quiero agradecer a las instituciones claves en la formación de nuevos científicos, estas son la Comisión Nacional Científica y Tecnológica (CONICYT) mediante las becas de postgrado, la Universidad de Santiago de Chile, Núcleo Milenio Magnetismo Básico y Aplicado, proyecto FONDECYT 1120356, Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia FB 0807 y al Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología (CEDENNA).

Finalmente quiero agradecer a Pascal, mi apoyo, mi alegría, quién siempre me ha motivado a continuar, con quién he compartido una buena parte de mi vida y me ha enseñado a valorar y respetar aquellas cosas buenas de la vida. Agradezco al destino el poder caminar junto a ti día a día.

*Roberto Escobar D.*

# Índice general

---

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>4</b>
1.1 Magnetismo y nanotecnología . . . . .	4
1.2 Grabación magnética: presente y desafíos . . . . .	6
1.3 Discos duros . . . . .	7
1.4 Límite superparamagnético . . . . .	12
1.5 Grabación longitudinal y perpendicular . . . . .	14
1.6 Memoria magnética de circuito o pista de carrera . . . . .	16
1.7 Comentarios generales . . . . .	18
<b>2 Fundamentos teóricos</b>	<b>19</b>
2.1 Conceptos básicos . . . . .	19
2.1.1 Clasificación de los materiales magnéticos . . . . .	20
2.2 Energías asociadas a sistemas magnéticos . . . . .	26

---

2.2.1	Energía de Intercambio . . . . .	26
2.2.2	Energía Dipolar . . . . .	28
2.2.3	Energía de Anisotropía . . . . .	29
	Anisotropía Uniaxial . . . . .	29
	Anisotropía Cúbica . . . . .	30
2.2.4	Energía de Zeeman . . . . .	31
2.3	Dominios magnéticos . . . . .	31
2.3.1	Estructura de Paredes de Dominio . . . . .	32
2.3.2	Paredes de Bloch . . . . .	33
2.3.3	Paredes de Néel . . . . .	34
2.3.4	Paredes de 90° . . . . .	35
2.4	Histéresis magnética . . . . .	36
2.5	Modos de reversión de la magnetización . . . . .	37
2.5.1	Reversión coherente . . . . .	38
2.5.2	Reversión mediante paredes de dominio . . . . .	38
2.6	Método de escalamiento . . . . .	40
2.6.1	Simulación de Monte Carlo y algoritmo Metropolis . . . . .	41
2.6.2	Método de Fast Monte Carlo . . . . .	43
<b>3</b>	<b>Multi-estabilidad en nanoestructuras magnéticas de baja simetría</b>	<b>45</b>
3.1	Introducción . . . . .	45

---

3.2	Modelo teórico . . . . .	47
3.3	Resultados . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Modos de reversión de nanoestructuras de baja dimensión</b>	<b>56</b>
4.1	Introducción . . . . .	56
4.2	Modelo teórico . . . . .	57
4.3	Resultados . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Control de la estabilidad magnética en multipelículas magnéticas para grabación tridimensional de información</b>	<b>70</b>
5.1	Introducción . . . . .	70
5.2	Modelo teórico . . . . .	72
5.3	Simulación numérica . . . . .	76
5.4	Resultados . . . . .	77
<b>6</b>	<b>Multicapas de <math>[\text{Co}/\text{Ni}]_n/\text{NiFe}</math>: Una propuesta para controlar la dirección de la anisotropía</b>	<b>84</b>
6.1	Introducción . . . . .	84
6.2	Modelo teórico . . . . .	87
6.3	Resultados. . . . .	89
<b>7</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>100</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>103</b>

# Índice de tablas

---

3.1	Campos magnéticos $H_t$ y $H_t/\mu$ asociados con la transición entre los estados descritos en la Fig. 3.3. . . . . .	52
3.2	Campos de transición promedio $H_t$ y $H_t/\mu$ correspondientes a las transiciones entre estados descritos en la Fig. 3.3 en presencia de rugosidad. . . . .	54
6.1	Valores para los parámetros magnéticos empleados . . . . .	88

# Índice de figuras

---

1.1	Ubicación de pistas y sectores en un disco duro comercial. (Microsoft®).	7
1.2	Esquema de la configuración de los granos magnéticos que conforman los bits ubicados en los sectores de cada pista en un disco duro comercial. (Microsoft®).	9
1.3	Disco duro comercial actual y sus partes. (Seagate®).	10
1.4	Diagrama de dos válvulas de espín con dos materiales ferromagnéticos (FM) separados por un material no magnético (NM).	11
1.5	Esquema de estados de un sistema biestable y su correspondiente barrera de separación entre estados.	12
1.6	Diagrama para grabación longitudinal (a) y grabación perpendicular (b).	15
1.7	Pista de grabación vertical con forma de U (a), arreglo de pistas (b) y configuración horizontal de pista de grabación (c). Los colores rojo y azul indican los dos tipos de regiones magnetizadas o dominios.	17

---

1.8	Cinta magnética con dos dominios ubicada bajo la pista de grabación. (a) Configuración de escritura de un bit en rojo, (b) escritura de un bit azul y c) lectura de la información mediante un sensor de campo ubicado en la cinta gris. . . . .	18
2.1	(a) Material diamagnético; Los átomos tienen un momento magnético total nulo cuando $H = 0$ , por lo que el valor de la magnetización es $M = 0$ . (b) Inducción de momento magnético en la dirección opuesta al campo externo aplicado, resultando así una magnetización que apunta en la dirección contraria al campo. . . . .	22
2.2	Imagen esquemática de un material paramagnético. (a) Orientación aleatoria de los momentos magnéticos atómicos en ausencia de campo $\vec{H}$ . Esta orientación al azar da como resultado una magnetización nula, $M = 0$ . (b) Magnetización no nula debida a la tendencia de los momentos magnéticos a orientarse en la dirección del campo $\vec{H}$ . . . . .	23
2.3	Esquema de la distribución de los 26 electrones del hierro. La tercera subcapa, denominada 3d, tiene 4 electrones desapareados, lo que origina sus propiedades magnéticas. . . . .	24
2.4	Configuración de los momentos magnéticos en un antiferromagneto. Su magnetización neta es nula en ausencia de campo externo. . . . .	25
2.5	Configuración de los momentos magnéticos de un material ferrimagnético. En ausencia de un campo externo el material tiene magnetización espontánea no nula. . . . .	26
2.6	Orientaciones permitidas para dos electrones según la distancia entre sí. . . . .	27

2.7	(a) Material ferromagnético con magnetización neta nula debido a la existencia de un gran número de dominios cuya magnetización está orientada al azar. (b) Crecimiento de dominios con el campo $\vec{H}$ . . . . .	32
2.8	Patrón de dominio cerrado en un cristal magnético. Las cargas magnéticas de los polos superficiales en el borde del dominio muestran que habrá carga neta nula cuando haya un dominio cerrado. . . . .	33
2.9	Esquema de una pared de Bloch. . . . .	34
2.10	Esquema para una pared de Néel. Los momentos rotan paralelos a la superficie de la muestra. . . . .	35
2.11	Esquema de una pared de dominio de $90^\circ$ . . . . .	36
2.12	Diagrama de una curva de histéresis: Detalle de los cambios en los dominios y magnetización en el proceso de reversión. . . . .	37
2.13	Diagrama de una reversión coherente. . . . .	38
2.14	Paredes de dominio en una cinta rectangular. (a) Estructura de la magnetización de una pared de dominio transversal. (b) Pared tipo vórtice con quiralidad en sentido (i) horario y (ii) antihorario. . . . .	39
3.1	Representación esquemática de una nanopartícula con forma de T. . . . .	47
3.2	Dependencia angular de las componentes normalizadas $m_x$ y $m_y$ respecto de la orientación del campo rotatorio externo. . . . .	49
3.3	Representación esquemática de las cuatro configuraciones de equilibrio del elemento tipo T. El círculo rojo muestra la pared de dominio entre ambas secciones de la estructura. . . . .	51

- 4.1 Curvas de magnetización y susceptibilidad alrededor del campo coercitivo, para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $x$ . El recuadro inserto muestra la curva de histéresis completa. Los puntos rojos sobre la curva de magnetización indican el paso del sistema a través de los estados en los que la susceptibilidad varía rápidamente. . . . . 59
- 4.2 Imágenes de la configuración de los momentos magnéticos en los estados indicados por los círculos rojos sobre la curva en la Fig. 4.1. Las flechas indican la presencia de dos paredes de tipo  $90^\circ$  y una pared de tipo  $180^\circ$ . . . . . 60
- 4.3 Curvas de magnetización y susceptibilidad alrededor del campo coercitivo para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $y$ . El recuadro inserto muestra el ciclo de histéresis completo. Los puntos sobre la curva de magnetización indican el paso del sistema a través de los estados en los que la susceptibilidad cambia rápidamente. . . . . 63
- 4.4 Configuración de los momentos magnéticos en los estados indicados por un punto sobre la curva de magnetización en la Fig. 4.3. Las flechas indican dos paredes de dominio de  $90^\circ$  y una de  $180^\circ$ . . . . . 65
- 4.5 Configuración de los momentos magnéticos en un sistema tipo T de ancho  $w = 40$  nm para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $x$ . . . . . 67
- 5.1 (a) Representación esquemática de un sistema de multicapas formado por películas magnéticas (rojo) separadas por un espaciador no magnético (gris). b) Nanocanales que permiten la síntesis de las películas magnéticas con sección rectangular. c) Vista superior de una muestra de películas magnéticas de Ni (blanco, de sección rectangular con dimensiones de 70 nm x 80 nm) separados por un espaciador de Cu (gris) preparados dentro de un nanocanal, de forma similiar a b). . . . . 73

5.2	$\xi = E_N^{int}/(NE^s)$ como función de $D$ multicapas formadas por $N$ películas magnéticas con dimensiones $L = 100$ nm, $w = 20$ nm y $t = 5$ nm. . . . .	78
5.3	Distancia crítica, $D_c$ , a la cual $\xi = 0.2$ en la Fig. 5.2 para diferente número de películas, $N$ , en el sistema de multicapas. . . . .	79
5.4	Ciclo de histéresis para multicapas de $N = 1, 5, 7$ y $9$ películas magnéticas separadas por $D = 5$ nm (a) y $D = 30$ nm (b). . . . .	80
5.5	Energía de interacción normalizada durante un ciclo de histéresis para un sistema de multicapas formado por $N = 9$ películas magnéticas. . . . .	81
5.6	Magnetización normalizada de una multicapa de $N=9$ películas magnéticas durante la relajación ( $H = 0$ ) como función del número de pasos de Monte Carlo, MCS. Cuando MCS=0, la multicapa está completamente saturada a lo largo de la dirección $x$ . La ilustración esquemática de las películas magnéticas inserta en la figura describe un sistema para $D = 5$ nm en el cual algunas de las películas invierten su magnetización debido a la interacción entre ellas. . . . .	82
6.1	Diagrama del sistema de multicapas estudiado mediante simulaciones de Monte Carlo. . . . .	87
6.2	Ciclos de histéresis de una nanoestructura de $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}(t)$ obtenidas mediante simulaciones de Monte Carlo tras aplicar un campo magnético (a) paralelo y (b) perpendicular al plano, con $t$ variando desde 0 a 20 nm. . . . .	91

---

6.3	Representación esquemática de la configuración de espines durante el proceso de reversión tras aplicar un campo perpendicular, para espesores de NiFe de (a) $t = 0$ nm (similar a $t = 5$ nm) y (b) $t = 10$ nm (similar a $t = 20$ nm). . . . .	92
6.4	(a) Imágenes de la componente $z$ de la magnetización de multicapas de Co/Ni antes y después del proceso de relajación para una muestra con $t = 20$ nm. b) Ángulo $\theta$ en cada monocapa para las cuatro muestras consideradas en el estudio. La línea punteada representa la interfase entre las películas de Co/Ni y NiFe. (c) Configuración de los momentos magnéticos en el plano $YZ$ para $t = 20$ nm. La escala de colores representa el cambio gradual en el ángulo. . . . .	95
6.5	Ciclo de histéresis para campo magnético paralelo (a) y perpendicular al plano (b), para un sistema de multicapas de $[\text{Co/Ni}]_4/\text{NiFe}(t)$ , con $t$ variando desde 0 a 3 nm. . . . .	97

# Resumen

---

Durante las últimas décadas el estudio de partículas magnéticas, tanto en arreglos regulares como elementos aislados con dimensiones del orden de los nanómetros, ha concitado un gran interés. Este creciente interés radica en la gran variedad de propiedades básicas que presentan estos nuevos sistemas, así como en el potencial que éstas ofrecen para aplicaciones diversas tales como dispositivos magnéticos de almacenamiento de información de alta densidad, memorias lógicas e incluso en medios de diagnóstico y tratamiento de enfermedades.

El comportamiento magnético de dichas estructuras está fuertemente influenciado por la forma del elemento, debido a su anisotropía de forma, la cual en ocasiones resulta ser determinante frente a otras energías del sistema.

Otro aspecto importante es el proceso de reversión de la magnetización, el cual es usualmente seguido con detalle para determinar su reproducibilidad y los campos asociados a cada proceso. Estos procesos pueden involucrar la formación de paredes de dominio, vórtices y antivórtices en un mismo elemento. Algunos de estos procesos pueden resultar complejos a la hora de buscar una caracterización experimental que proporcione detalles del sistema y entregue información de la estructura magnética interna, por lo que un análisis teórico puede ser de gran utilidad.

En base a estas ideas, el objetivo de esta tesis es el estudio de sistemas magnéticos nanoestructurados con geometría rectangular, buscando ya sea características

magnéticas particulares o configuraciones en las que sus propiedades magnéticas permitan su uso en dispositivos tecnológicos.

En el marco de esta tesis se estudiaron tres sistemas, los elementos rectangulares con forma de T, los sistemas de multicapas magnéticas separadas por espaciadores no magnéticos y sistemas de multicapas con distintas fuentes de anisotropía. Los distintos estudios fueron realizados mediante simulaciones de Monte Carlo en combinación con la técnica de escalamiento, lo que nos permitió obtener los ciclos de histéresis y los modos de reversión con el detalle necesario para obtener conclusiones robustas.

En relación a los elementos con forma de T hicimos dos estudios. En el primero de ellos, la baja simetría de este sistema nos permitió encontrar cuatro estados de equilibrio, los cuales son estables, y los campos asociados a las transiciones entre ellos permiten apreciar un potencial para grabación de información de un orden superior al binario. El segundo aborda muy detalladamente los procesos de reversión de la magnetización, evidenciando la formación de diferentes configuraciones magnéticas en el interior del elemento, como paredes de  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ , vórtices y antivórtices, y relacionando su participación en el proceso con las curvas de magnetización y susceptibilidad. La complejidad de los procesos de reversión de la magnetización puede asociarse con la baja simetría de estos sistemas tipo T.

Los sistemas de multicapas magnéticas separadas por espaciadores no magnéticos se muestran como una configuración con potencial para ser utilizados como sistema de grabación de información. En este sistema se estudió la estabilidad magnética y los efectos de la interacción dipolar entre  $N$  elementos magnéticos con el propósito de identificar un régimen en el cual cada película magnética se comporte de manera independiente del resto, requisito fundamental para diseñar un sistema de grabación tridimensional. Esto es, se buscó determinar el espesor crítico que debe tener el material no magnético para que la interacción dipolar entre elementos pueda ser despreciada.

---

El tercer sistema considerado consiste en multicapas formado por películas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}$ , acopladas entre sí mediante interacción de intercambio. En estas estructuras compiten dos tipos de anisotropía, la anisotropía de forma (en el plano) y la fuera del plano, debida a la anisotropía cristalina de la película de Co/Ni. Los resultados obtenidos en nuestras simulaciones indican que es posible controlar la dirección de la anisotropía efectiva del sistema mediante el aumento en el espesor de la capa de NiFe. Esto se traduce también en cambios en los modos de reversión al aumentar el espesor de la película de NiFe.

De esta forma mostramos que las estructuras rectangulares poseen comportamientos complejos e interesantes, pero totalmente reproducibles, lo que los potencia como una buena alternativa a explorar en la búsqueda de sistemas de grabación de alta densidad.

## Capítulo 1

# Introducción

---

### 1.1. Magnetismo y nanotecnología

Desde su descubrimiento, el magnetismo ha sido una disciplina que ha concitado la atención y curiosidad en todos quienes conocen sus aplicaciones. Un claro ejemplo es la brújula, un simple pero indispensable instrumento usado hasta el día de hoy. De forma similar, el nanomagnetismo es actualmente una de las áreas con mayor potencial en el ámbito de la nanotecnología.

El impacto de las nanoestructuras magnéticas reside en la gran diversidad de sistemas que existen, tanto en forma natural como preparados artificialmente, y cuyas propiedades permiten una gran cantidad de aplicaciones en diferentes áreas. En este ámbito, la atención ha estado centrada en la generación de dispositivos de almacenamiento de información, sensores y aplicaciones diversas en nanobiomedicina. Si bien son estas últimas aquellas en que la inversión de recursos es mayor, es en el ámbito de almacenamiento de información donde se han desarrollado las primeras aplicaciones del nanomagnetismo. Un claro ejemplo es el fenómeno denominado magnetoresistencia (MR) el cual consiste en el cambio de la resistencia de un conductor en presencia de un campo magnético externo. Usualmente los cambios

en la resistencia de películas magnéticas delgadas debido a un campo externo son pequeños [42]. Sin embargo, para sorpresa de todos, en el año 1998 dos grupos de investigación, uno liderado por el Dr. Peter Grünberg [10] y otro liderado por el Dr. Albert Fert [9], encontraron, de forma independiente pero simultáneamente, que un sistema de multicapas de Fe/Cr/Fe acopladas antiferromagnéticamente, orientadas a lo largo de la dirección (100), presentaba valores de magnetoresistencia mucho más altos que los registrados si sólo se tenía una película de Fe. Específicamente hallaron una disminución de la resistencia de las multicapas en un factor dos tras aplicar un campo de 20 kOe aproximadamente a una temperatura de 4.2 K. Este fenómeno fue denominado Magnetoresistencia Gigante (GMR), es utilizado en los cabezales de lectura de los computadores y le valió a sus descubridores el premio Nobel de Física el año 2007 [1].

Si bien la magnetoresistencia gigante permitió incrementar la densidad de grabación al facilitar su lectura, también el nanomagnetismo puede ser utilizado para incrementar la densidad de información directamente. Es así que desde la invención de la computadora, en 1956, se ha trabajado intensamente en la búsqueda de medios de almacenamiento prácticos y duraderos, que garanticen la estabilidad y correcto manejo de la información al menos por 10 años [54]. Con el tiempo, nuevos medios de grabación se han generado, y la velocidad de acceso y la densidad de información disponible para grabación aumentaron a la par con las investigaciones en materiales magnéticos [2]. Los medios de almacenamiento comerciales alcanzan una capacidad del orden de los Terabit, con un tiempo de acceso a la información que está en la escala de los milisegundos, mientras que las memorias magnéticas de acceso aleatorio (MRAM) tienen una capacidad de almacenamiento de Megabits, pero con un tiempo de acceso de los nanosegundos [35]. Esta intrincada relación entre densidad de almacenamiento y tiempo de acceso a la información es un desafío ampliamente abordado.

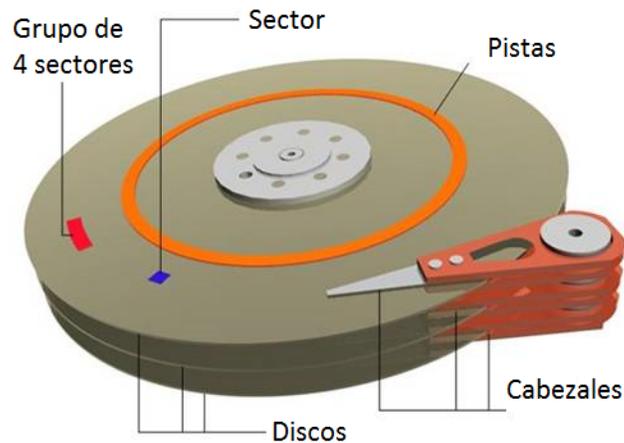
Entre las diversas aplicaciones existentes en el campo de las nanoestructuras magnéticas también encontramos potencial uso de nanopartículas en sistemas de diagnóstico médico, como son las nanopartículas de magnetita que permiten mejorar el contraste de la imagen obtenida mediante resonancia magnética nuclear. También se han generado sistemas que optimizan tratamientos médicos, como es el caso de la entrega de fármacos encapsulados en nanoestructuras magnéticas. Otro ejemplo a destacar es la utilización de nanopartículas que permiten alargar la vida de diversos alimentos al ser incorporadas en envases inteligentes. Estas nanopartículas pueden tener propiedades antibacterianas, antimicrobianas, absorbentes de etileno, absorbentes de oxígeno, y otras, según sea la necesidad del alimento.

En suma, el interés en la nanotecnología en nuestros días está gatillado por los posibles desarrollos que conlleven alguna implicancia social, lo que requiere una mayor y mejor comprensión de los fenómenos asociados y, paralelamente, una fuerte integración entre ciencia e ingeniería que de origen a un mundo nuevo de productos que mejoren y faciliten nuestra vida, más allá de la tecnología actual.

## 1.2. Grabación magnética: presente y desafíos

La grabación magnética es uno de los más importantes ejemplos de cómo la tecnología ha transformado nuestra vida. Esta se basa en el bit, que es la unidad básica de información, y el que puede tener dos estados posibles. Es por ello que el magnetismo, con su unidad básica de espín con dos valores posibles, es una buena propuesta para estos efectos. Sin embargo, el espín de un electrón tiene una magnitud muy pequeña y difícil de medir, por lo que a la fecha no puede ser utilizado como unidad básica de almacenamiento de información. Por ello, para definir un bit usualmente se utiliza una región del tamaño de los micrómetros, la que está magnetizada en una dirección o en la opuesta. Esto origina grandes regiones con

determinados patrones de magnetización que corresponden a una sucesión de bits. En un disco duro, dichos patrones son circulares, contienen millones de bits y se denominan pistas, tal como se muestra en la Fig. 1.1. Dentro de cada pista se encuentran los denominados sectores, los que equivalen a 512 bytes.



**Figura 1.1:** Ubicación de pistas y sectores en un disco duro comercial. (Microsoft®).

A continuación se describen algunos medios y métodos de grabación magnética.

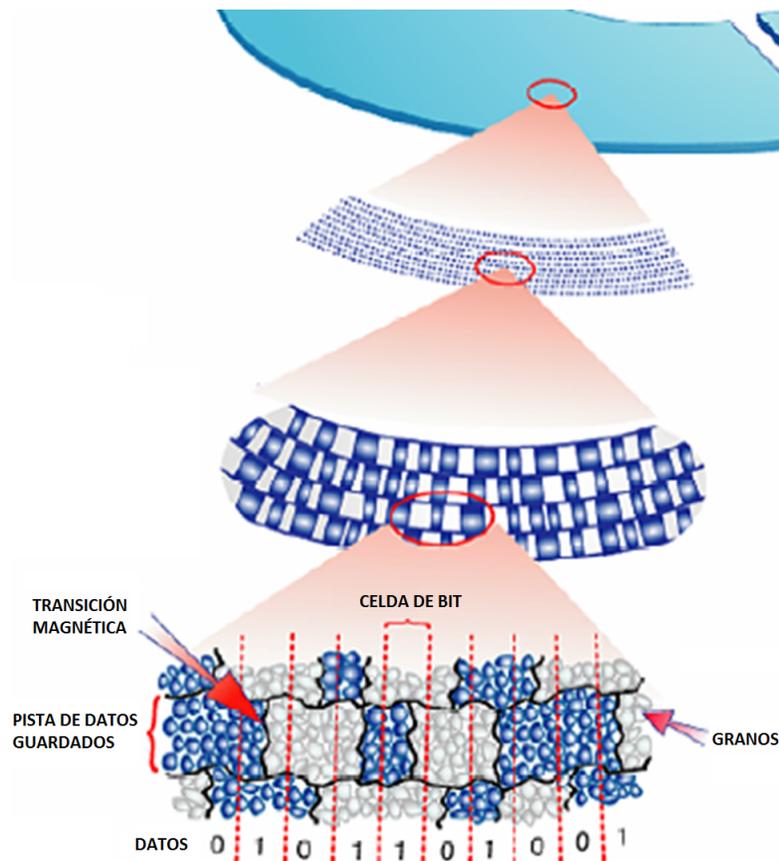
### 1.3. Discos duros

El disco duro es un dispositivo de almacenamiento de información formado principalmente por discos metálicos sobre los que se deposita una película delgada de material magnético, comúnmente de aleaciones de cobalto. En cada uno de estos discos hay muchas pistas, las que a su vez están formadas por sectores (ver Fig. 1.1) que contienen la información. Si enfocamos una mirada microscópica dentro de cada sector veremos que 1 *bit* de información está formado por granos magnéticos, cuya cantidad puede variar entre 100 y 1000 granos por bit, tal como se esquematiza en la Fig. 1.2. En términos generales, los cambios secuenciales en la dirección de la magnetización representan información en un código binario, es decir, bits de

---

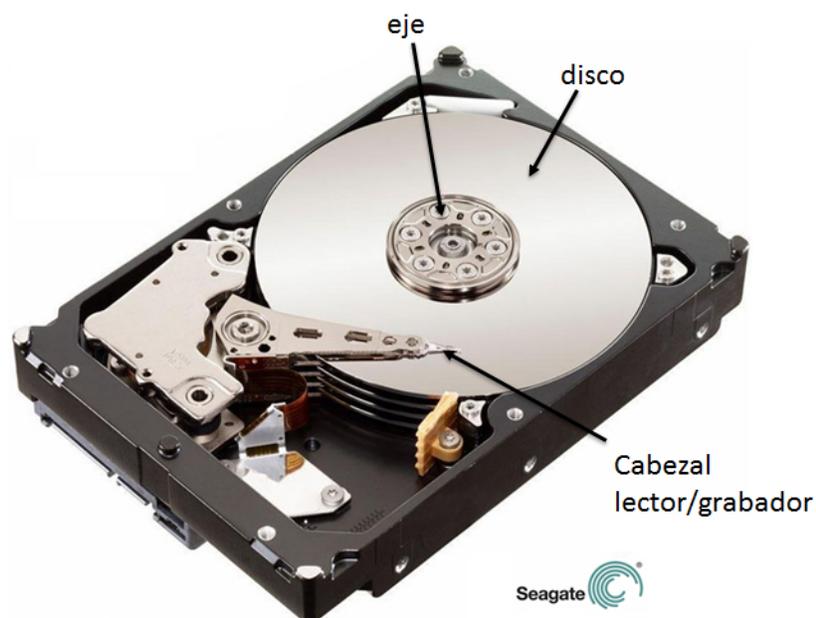
información. Las grabaciones efectuadas en el disco son recuperadas mediante la detección de cada área magnetizada, el bit.

El disco duro ha sufrido una evolución gigantesca a lo largo del tiempo, y su diseño ha cambiado de manera radical hasta la actualidad. El primer disco comercializado fue lanzado al mercado en 1956 por IBM, como parte del computador IBM 305 RAMAC (RAMAC: Método de acceso aleatorio de conteo y control). Si bien hasta hace algunos años atrás se pensaba que la capacidad de almacenamiento de un disco duro no superaría la barrera de los 3 TB debido a limitaciones físicas, actualmente se han fabricado sistemas capaces de almacenar 10 TB de información. Esta hazaña fue lograda por la empresa HGST, perteneciente a Western Digital [3]. Por otra parte, Seagate ha fabricado discos de 6 TB de capacidad ( $1 \text{ TB}/\text{in}^2$ ) y ha anunciado que espera alcanzar el límite de 60 TB en un disco duro comercial en el año 2019 [4].



**Figura 1.2:** Esquema de la configuración de los granos magnéticos que conforman los bits ubicados en los sectores de cada pista en un disco duro comercial. (Microsoft®).

La Fig. 1.3 ilustra las partes que componen un disco duro actual. El disco o plato (o conjunto de platos) está cubierto con una película magnética sobre la cual se graba (o lee) información con una velocidad de giro de entre 5400 y 7200 rpm. El cabezal lector/grabador recorre las pistas circulares. Al momento de grabar, el cabezal magnetiza áreas consecutivas mediante la generación de un gran campo magnético local, el que puede ser perpendicular al plano del disco o paralelo.



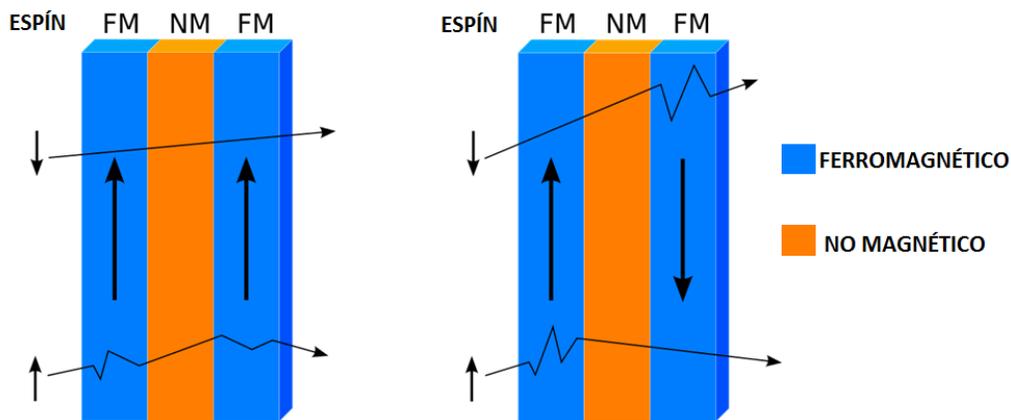
**Figura 1.3:** Disco duro comercial actual y sus partes. (Seagate®).

El lector recupera la información detectando el campo remanente en el área magnetizada. En estricto rigor, el cabezal lector/grabador moderno usa un método de decodificación que traduce ceros y unos en patrones de flujo magnético y viceversa.

La película magnética que compone el disco presenta una estructura cristalina de granos, donde cada grano es efectivamente un monodominio magnético con un tamaño que va desde 5 hasta 10 nm, aproximadamente. Un bit es una región que típicamente contempla de 100 a 1000 granos con una magnetización mayoritariamente homogénea. Se requiere una cantidad mínima de granos comprendidos en un bit de área ya que si la cantidad de granos es menor a lo anteriormente señalado, la señal contendrá mucho ruido, lo que afectará la grabación y/o lectura de la información [58].

Más allá de las alteraciones que ha sufrido el diseño de estos aparatos, los avances en magnetismo y espintrónica han impulsado cambios en la densidad de almacenamiento. Un gran cambio fue favorecido por el descubrimiento de la magneto resistencia gigante (GMR) en 1998 realizado por Grünberg y Fert [10, 9], que permitió

desarrollar lectores altamente sensibles basados en este principio. Un dispositivo GMR consiste de una capa fija y una capa ferromagnética libre, separada por una capa delgada no ferromagnética y una capa antiferromagnética fija con contacto eléctrico en un costado. La resistencia eléctrica ante una corriente que fluye a través de las capas depende fuertemente de la orientación relativa de la magnetización en las dos capas ferromagnéticas, es decir, de la dirección de la magnetización de la capa libre, como se muestra en la Fig. 1.4. Por lo tanto este dispositivo es un detector de campo altamente sensible. Dada la alta sensibilidad de estos lectores de campo fue posible continuar incrementando la densidad de grabación de información, pues con los lectores tradicionales se estaba al límite de sensibilidad.



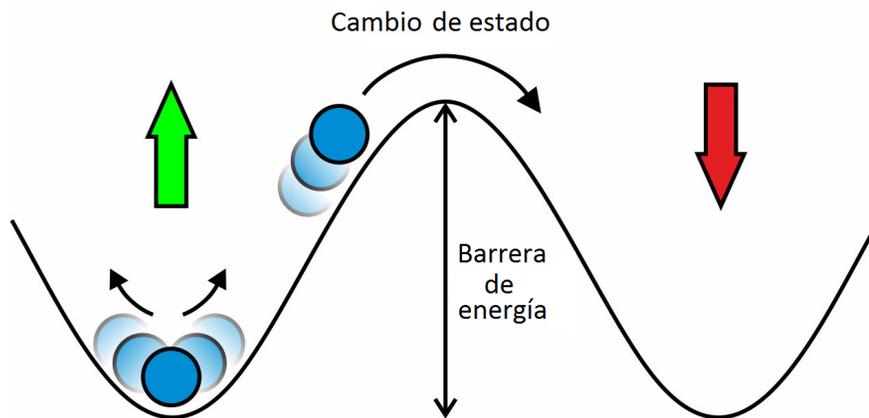
**Figura 1.4:** Diagrama de dos válvulas de espín con dos materiales ferromagnéticos (FM) separados por un material no magnético (NM).

Además del problema de la sensibilidad para la lectura, el desarrollo de nuevos discos duros con mayor densidad de almacenamiento de información está coartado por el límite superparamagnético, el cual aparece al disminuir el tamaño de los sistemas en los cuales se graba. A la fecha, y a pesar de grandes esfuerzos científicos enfocados en el aumento de la anisotropía de los sistemas, no ha sido posible superar dicho límite.

## 1.4. Límite superparamagnético

Los variados esfuerzos por incrementar la cantidad de bits disponibles por unidad de área en un disco duro comercial deben considerar las variables físicas involucradas en el proceso de grabación y lectura de información. Así mismo resulta indispensable considerar la estabilidad del sistema, asegurando que la información no se borrará en el tiempo. Esto compite con nuestro interés en incrementar la densidad de información mediante la disminución del tamaño de las nanoestructuras magnéticas, pues con los tamaños actuales nos acercamos al denominado límite superparamagnético.

Para aclarar este concepto consideremos una partícula magnética con anisotropía uniaxial. Bajo estas condiciones una partícula tiene dos orientaciones de su magnetización que minimizan la energía y, por consiguiente, permanecerá en uno de estos estados siempre que la temperatura a la cual esté no le permita superar la barrera de energía  $\Delta E$  (ver Fig. 1.5).



**Figura 1.5:** Esquema de estados de un sistema biestable y su correspondiente barrera de separación entre estados.

La barrera de energía que impide la reversión de la magnetización de un sistema, fijando la magnetización en una dirección y con ello asegurando la estabilidad de esta

es dada por

$$\Delta E = K_u V, \quad (1.1)$$

donde  $K_u$  es la constante de anisotropía uniaxial y  $V$  es el volumen de la partícula.

Si la partícula es pequeña es posible que la energía térmica sea comparable, o incluso mayor, que la energía de anisotropía, es decir,  $K_B T \geq K_u V$ , donde  $K_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. Cuando esto sucede el sistema pierde estabilidad magnética, pudiendo pasar de un estado a otro, e impidiendo una lectura confiable de la información grabada en el sistema. El tiempo promedio en el cual ocurre la reversión de la magnetización provocada por perturbaciones térmicas dependerá del tamaño de la barrera de energía (Ec. (1.1)) y de la temperatura del sistema. Este tiempo de decaimiento se conoce como ley de Arrhenius-Néel y está definido como

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{K_B T}\right). \quad (1.2)$$

En la expresión anterior,  $\tau_0$ , es una constante asociada al tiempo en el cual el sistema fluctúa (en nanosegundos) entre los estados de mínima energía posibles. A la hora de observar o medir el sistema es posible verificar si existe la posibilidad de que nuestro tiempo de medición,  $\tau_m$ , sea mayor o menor que el tiempo de relajación  $\tau$ . Si  $\tau_m > \tau$ , entonces la magnetización del sistema está cambiando muy rápidamente, de forma que medimos una magnetización nula. Por el contrario si  $\tau_m < \tau$ , se dice que el sistema está bloqueado, es decir, su magnetización apunta en una dirección fija. La temperatura de bloqueo,  $T_B$ , es el parámetro que permite diferenciar ambos regímenes. Si estamos interesados en determinar el tamaño crítico ( $V_c$ ) de una partícula con el objetivo de que la magnetización sea estable a una temperatura  $T$ , es posible utilizar las ecuaciones (1.1) y (1.2) y obtenemos la siguiente relación

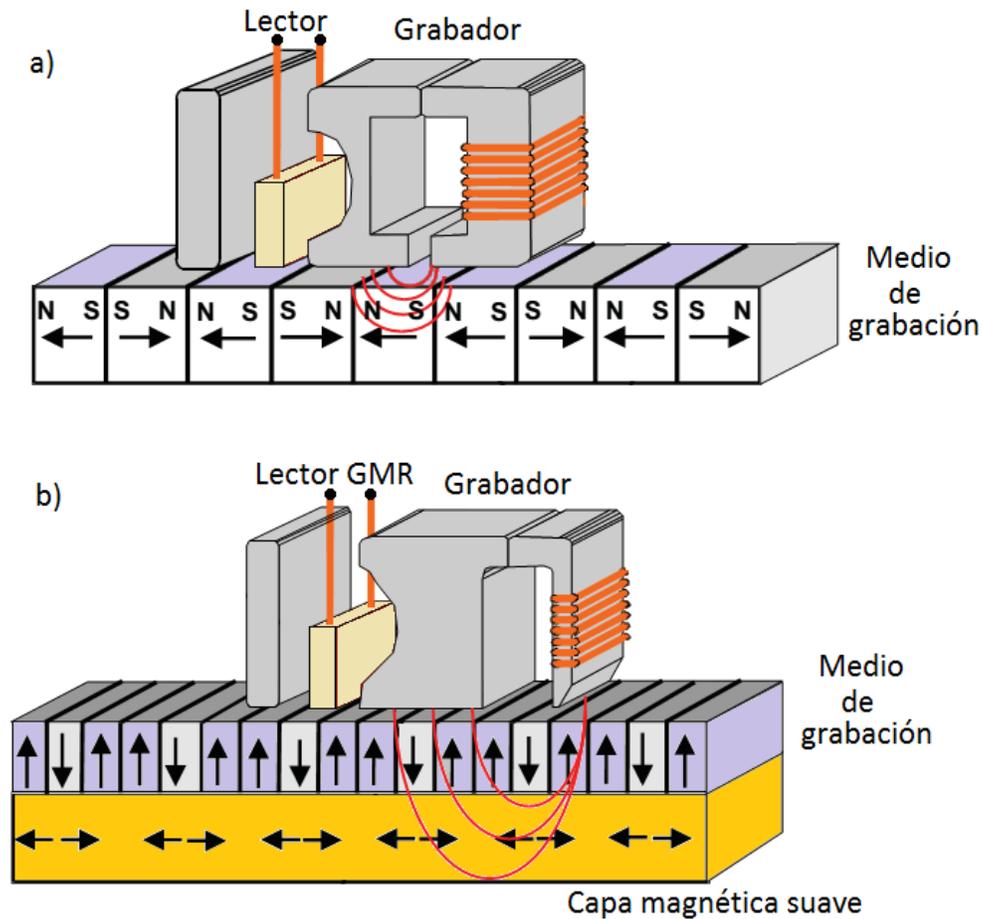
$$\ln\left(\frac{\tau_m}{\tau}\right) = \frac{K_u V_c}{K_B T}. \quad (1.3)$$

La estabilidad térmica de un bit de información es tal que debe satisfacer que

$K_u V / K_B T \geq 40$ , es decir, se espera que la barrera de energía, del orden de  $K_u V$ , sea al menos un orden de magnitud mayor a la energía térmica,  $K_B T$ , para asegurar su estabilidad por al menos 10 años considerando que la grabación estará a temperatura ambiente. Al buscar un aumento en la densidad de información disminuyendo las dimensiones del elemento, habrá una reducción en la barrera de energía dada por  $KV$ , lo que hace necesario tener una mayor anisotropía uniaxial para que el producto asegure la estabilidad.

## 1.5. Grabación longitudinal y perpendicular

Tal como se mencionó anteriormente, un disco duro es un dispositivo de almacenamiento de información que utiliza la magnetización de una película delgada depositada sobre los discos o platos que lo conforman. Existen dos métodos para incorporar la información en el disco, estos son el método de la grabación perpendicular (PMR) o grabación longitudinal (LMR). Para grabación perpendicular (PMR) los “bits magnéticos” son arreglos de elementos cuya dimensión mayor es perpendicular a la superficie del disco. De esta forma la magnetización apunta perpendicularmente a la pista de grabación, explotando así la dirección favorable de anisotropía de forma de cada elemento. Este uso de la anisotropía de forma está asociado a una menor área en la superficie del disco, lo que hace de la PMR una buena alternativa para incrementar la densidad de información. Por otro lado, si la grabación magnética es longitudinal (LMR), la magnetización en los bits es paralela a la superficie del disco, formando pistas que circulan alrededor del centro del disco. La Fig. 1.6 muestra un sistema de grabación longitudinal (a) y perpendicular (b) junto con el cabezal lector/grabador en cada caso [5].



**Figura 1.6:** Diagrama para grabación longitudinal (a) y grabación perpendicular (b).

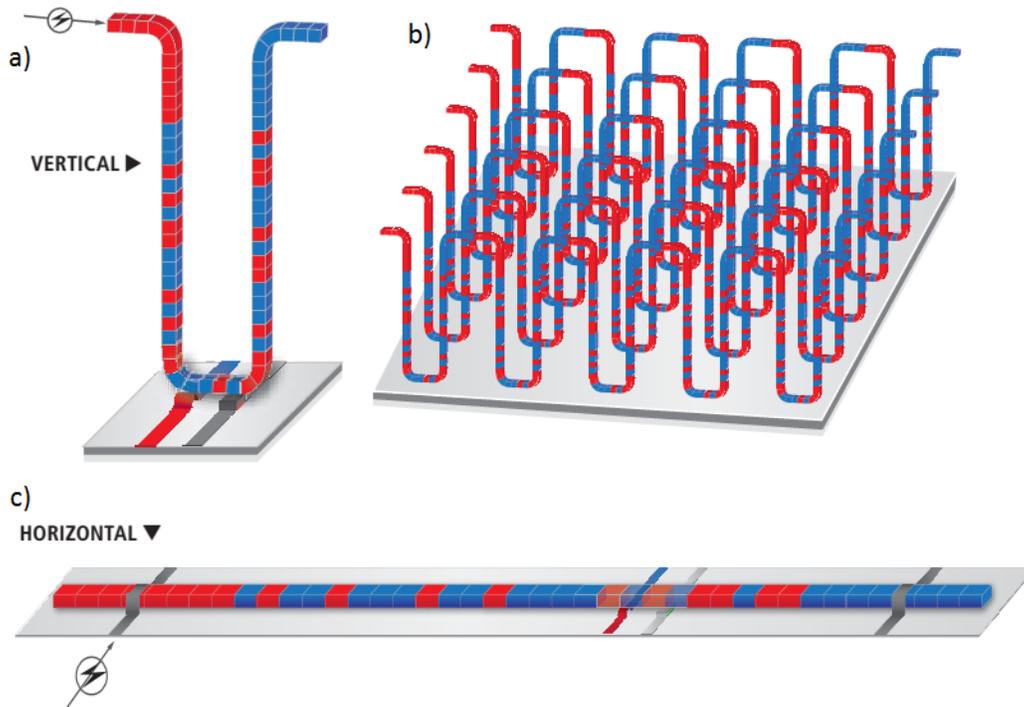
Algo importante a destacar en el sistema de grabación perpendicular, a diferencia de LMR en donde sólo se necesita el cabezal lector/grabador, es la presencia de una capa magnética suave denominada SUL (soft magnetic underlayer). La SUL está ubicada bajo la capa de material magnético que recibirá la información y ayuda en la conducción del flujo de campo desde el polo principal del cabezal al polo auxiliar. En definitiva la SUL es altamente permeable, actuando como un “espejo magnético”, incrementando el gradiente de campo generado por un polo del cabezal en la dirección perpendicular. Esto permite que también forme parte del cabezal grabador. El incremento en la intensidad de campo del cabezal grabador abre la posibilidad de

escribir en medios con mayor anisotropía comparados con la grabación longitudinal (LMR) y da lugar a una mayor estabilidad térmica debido al uso de materiales magnéticos con mayor coercividad. Si bien estos sistemas requieren mayores campos para grabar, una vez grabada la información, la magnetización es inherentemente más estable. Entre algunos materiales utilizados como SUL se encuentra CoTaZr debido a que presenta bajas irregularidades en la magnetización. En definitiva el sistema perpendicular de almacenamiento permite incrementar la densidad de información, explotando no sólo la geometría del sistema sino también las interacciones físicas fundamentales involucradas en el dispositivo.

## 1.6. Memoria magnética de circuito o pista de carrera

La memoria magnética de circuito (Racetrack Memory) es un concepto elaborado en los últimos años relacionado con los medios de almacenamiento magnético [53]. También está basada en efectos magnéticos y corrientes de espín para almacenamiento no volátil de información (o sea, la información no se pierde cuando el medio está apagado), pero, a diferencia de los discos duros, la memoria magnética de circuito almacena información de forma tridimensional, logrando así un gran aumento en la densidad de almacenamiento de información.

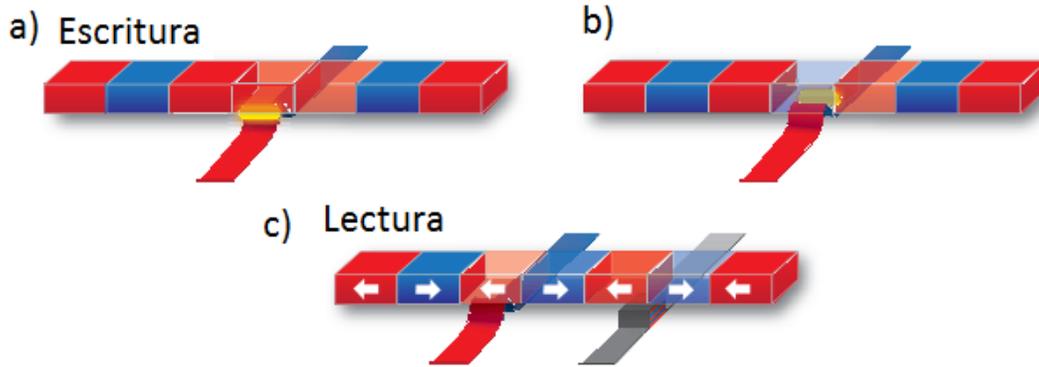
Este dispositivo consiste en un grupo de circuitos (racetracks), donde cada pista corresponde a un hilo nanoscópico con forma de U hecho de un material magnético como permaloy. El arreglo de pistas permanece sobre una oblea de silicio. A lo largo del nanohilo hay una serie de dominios magnéticos separados por paredes de dominio que permiten la codificación de la información (ver Fig. 1.7). El movimiento de las paredes a lo largo del nanohilo es causado por la aplicación de pulsos de corriente de espín polarizada en los extremos, para así controlar el torque sobre el sistema.



**Figura 1.7:** Pista de grabación vertical con forma de U (a), arreglo de pistas (b) y configuración horizontal de pista de grabación (c). Los colores rojo y azul indican los dos tipos de regiones magnetizadas o dominios.

La información almacenada es escrita y leída por un cabezal ubicado en la parte inferior de la pista, justo sobre la base de silicio (ver Fig. 1.8). Para esto se utiliza una cinta magnética que tiene una pared que separa dos dominios, destacada en la Fig. 1.8.a con color amarillo. Esta cinta registra la información cambiando la polaridad de las regiones magnéticas. La Fig. 1.8.c muestra el sensor de campo (cinta de color gris ubicado al costado de la cinta de escritura) que lee la información midiendo las variaciones en la magnetización.

Este arreglo de pistas con forma de U interconectadas constituyen un medio de almacenamiento tridimensional con capacidades potencialmente mucho mayores que los medios bidimensionales propuestos actualmente.



**Figura 1.8:** Cinta magnética con dos dominios ubicada bajo la pista de grabación. (a) Configuración de escritura de un bit en rojo, (b) escritura de un bit azul y c) lectura de la información mediante un sensor de campo ubicado en la cinta gris.

## 1.7. Comentarios generales

Resulta importante mencionar que esta tesis es un trabajo teórico de ciencia básica que, en el marco de estas consideraciones generales de estabilidad e incremento de densidad de información, plantea algunas alternativas de sistemas que podrían ser explorados en más detalle por los expertos quienes deben considerar una diversidad de aspectos que deben ser aun evaluados en el marco de trabajo multidisciplinario, más allá de este trabajo.

Como se mostrará en los próximos capítulos, los sistemas estudiados cumplen con algunos requerimientos fundamentales para ser utilizados como estructuras de grabación, acorde a un marco teórico adecuado al diseño de sistemas de información de alta densidad.

Por último, cabe mencionar que para mantener la notación con las gráficas incluidas en el trabajo se utilizará punto en lugar de coma para la notación decimal.

# Fundamentos teóricos

---

En esta sección describiremos los principios y fundamentos físicos necesarios para comprender las propiedades magnéticas de nanoestructuras, considerando desde definiciones básicas hasta las diferentes contribuciones a la energía del sistema.

## 2.1. Conceptos básicos

En una estructura magnética la respuesta del sistema frente a un campo magnético obedece principalmente, pero no exclusivamente, al momento magnético de los electrones que lo conforman. Existen dos contribuciones al momento magnético de los electrones:

- El momento magnético orbital, asociado al momento angular orbital de los electrones.
- El momento magnético de espín, debido al momento angular de espín.

Además de las contribuciones recién mencionadas, existe una pequeña contribución proveniente del momento angular de espín de los núcleos atómicos, denominado

momento magnético nuclear. Sin embargo, este momento magnético es muy pequeño, del orden de  $10^{-3}$  veces el momento magnético electrónico, por lo que su interacción con el campo magnético externo es en general apantallada por la interacción del momento magnético electrónico. Cabe mencionar que el momento magnético nuclear puede ser detectado mediante la técnica de resonancia magnética nuclear. De esta forma, el responsable de la respuesta que puede tener un material magnético ante un campo externo es fundamentalmente el momento magnético total electrónico, el cual está dado por la suma del momento magnético de espín y angular.

### 2.1.1. Clasificación de los materiales magnéticos

Si la mayoría de los momentos magnéticos de un sistema apuntan a lo largo de una misma dirección, este presentará una magnetización neta. La magnetización,  $\vec{M}$ , se define como el momento magnético neto por unidad de volumen del material. La unidad del momento magnético es  $Am^2$  por lo que la unidad de la magnetización es  $A/m$ .

Un material en presencia de un campo magnético  $\vec{H}$  actúa de distintas formas, dado que los momentos magnéticos responden generando un campo neto denominado campo de inducción magnética  $\vec{B}$  dado por

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.1)$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética del vacío ( $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} N/A^2$ ). De la misma manera es posible reescribir el campo magnético total,  $\vec{H}$ , como la contribución del campo externo aplicado  $\vec{H}_a$  y el campo debido a la presencia del material, denominado campo desmagnetizante  $\vec{H}_{dip}$ .

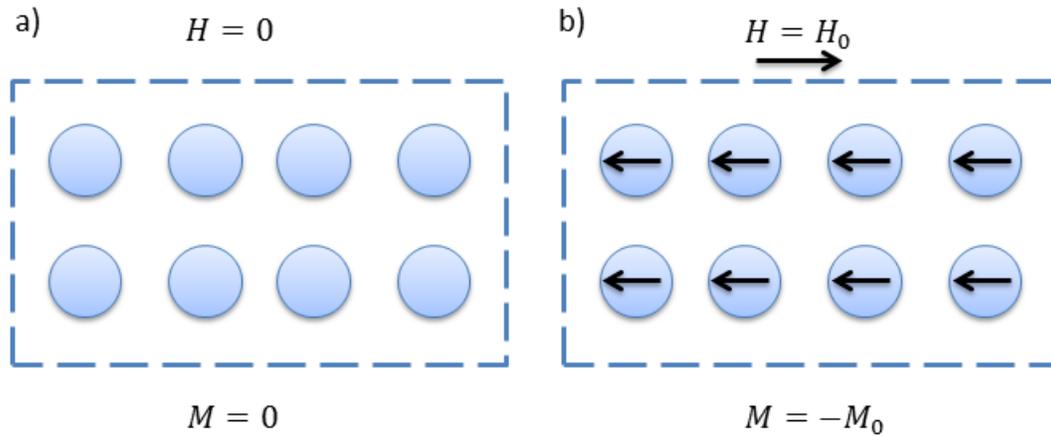
La variación de la magnetización en función del campo externo aplicado se conoce como susceptibilidad, la que se define como

$$\chi = dM/dH, \quad (2.2)$$

la cual es una cantidad adimensional.

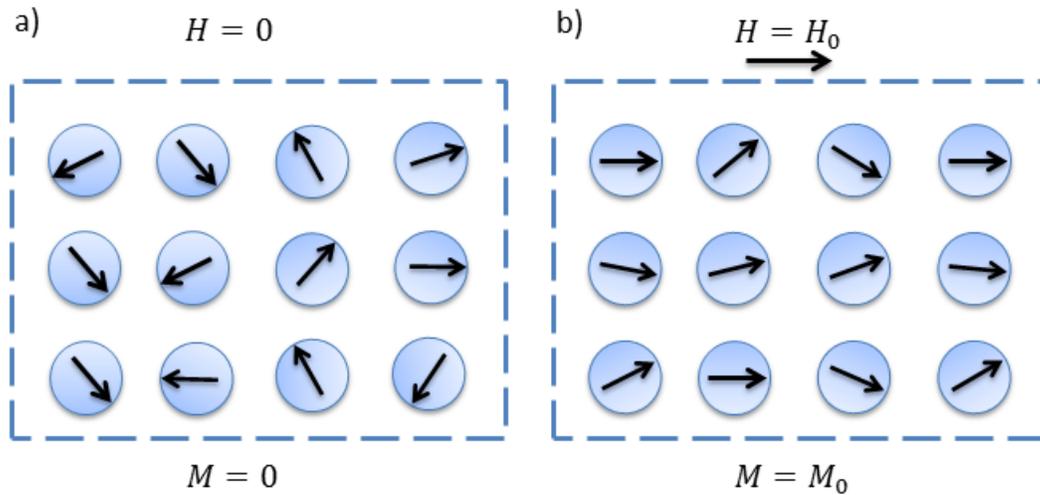
En general el comportamiento de un sistema magnético se asocia a la forma que sigue su magnetización en función del campo externo aplicado  $\vec{H}$ . Esta respuesta de un material magnético al campo externo nos permite clasificar los materiales en diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos, entre otros.

Todos los materiales presentan una contribución diamagnética, la cual se origina en la deformación de la órbita de los electrones debido al deseo de apantallar el campo externo. Es así que en presencia de un campo externo los momentos magnéticos de un sistema diamagnético inducen un campo que se opone al campo externo, tal como muestra la Fig. 2.1. Esto provoca la repulsión de estos materiales al acercarse a un imán. En términos de susceptibilidad, estos materiales tienen un comportamiento lineal pero con pendiente negativa, es decir,  $\chi < 0$ . Este fenómeno está presente en todos los materiales, pero su magnitud es muy pequeña por lo que sólo es evidente si no existe otra respuesta magnética presente. El caso de los elementos metálicos es en general complejo. Si se tiene en cuenta que un metal puede estar formado por iones positivos y electrones libres, tendremos una contribución diamagnética de los electrones que forman las capas completas de los iones, una contribución diamagnética de los electrones de conducción (Landau) como consecuencia de su movimiento orbital y además una contribución paramagnética de los electrones de conducción (Pauli) debido a su espín. La suma de todas las contribuciones determina el carácter magnético del material. El diamagnetismo es la respuesta dominante en materiales como el oro, plata y el cobre mientras que el aluminio o el manganeso con paramagnéticos.



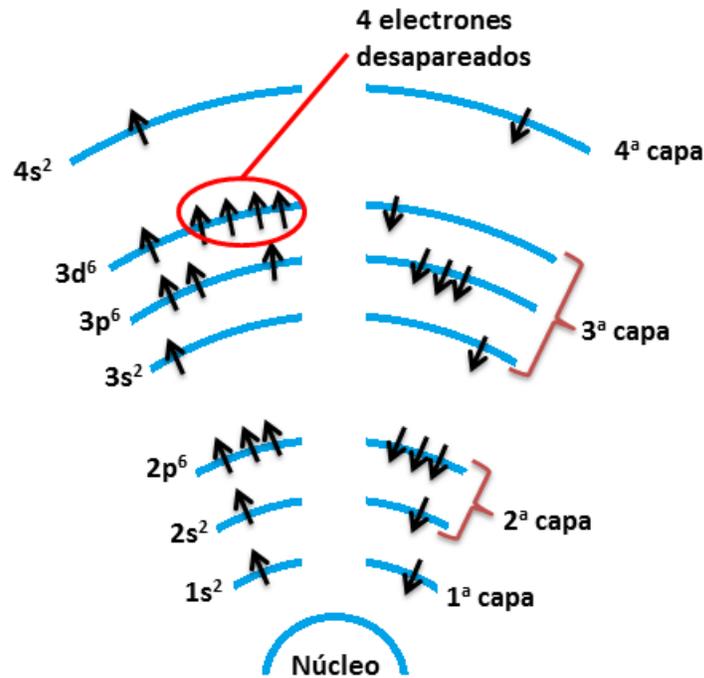
**Figura 2.1:** (a) Material diamagnético; Los átomos tienen un momento magnético total nulo cuando  $H = 0$ , por lo que el valor de la magnetización es  $M = 0$ . (b) Inducción de momento magnético en la dirección opuesta al campo externo aplicado, resultando así una magnetización que apunta en la dirección contraria al campo.

Los materiales paramagnéticos tienen un momento magnético atómico no nulo, es decir, tienen electrones no apareados con capas atómicas incompletas, de forma que su momento angular de espín y orbital total,  $J$ , es no nulo. Aún así no presentan un momento magnético neto en forma espontánea. Esto se debe a que no hay ninguna interacción que ordene los momentos magnéticos de cada átomo, apuntando cada uno en diferentes direcciones, y generando así una magnetización neta nula en el material en ausencia de campo externo. Sin embargo, al aplicar un campo externo los momentos magnéticos se orientan paralelos al campo y, por consiguiente, presentan una susceptibilidad magnética positiva. La Fig. 2.2 muestra un diagrama de la configuración de los momentos del sistema y su respuesta magnética frente a un campo externo. Algunos ejemplos de este tipo de materiales son el aluminio y el magnesio.



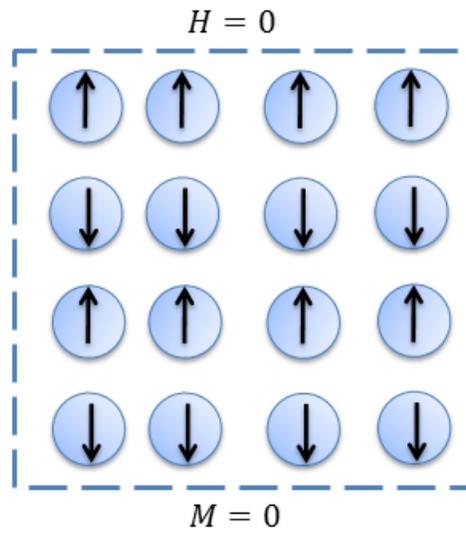
**Figura 2.2:** Imagen esquemática de un material paramagnético. (a) Orientación aleatoria de los momentos magnéticos atómicos en ausencia de campo  $\vec{H}$ . Esta orientación al azar da como resultado una magnetización nula,  $M = 0$ . (b) Magnetización no nula debida a la tendencia de los momentos magnéticos a orientarse en la dirección del campo  $\vec{H}$ .

Los materiales ferromagnéticos se caracterizan por tener un momento magnético atómico no nulo en ausencia de campo externo. Esto se debe a que hay entre ellos una interacción, conocida como de intercambio, que es responsable de la orientación paralela entre momentos magnéticos vecinos. Ejemplos conocidos son el hierro, el cobalto y el níquel, algunas aleaciones y las llamadas tierras raras. Los materiales ferromagnéticos tienen electrones desapareados en las capas más externas, a diferencia de los electrones en las capas más internas, que están completas y, por consiguiente, tienen un momento angular orbital y de espín netos nulo. Por ejemplo, la Fig. 2.3 presenta el diagrama para la configuración de los espines en las capas electrónicas del hierro con 26 electrones.



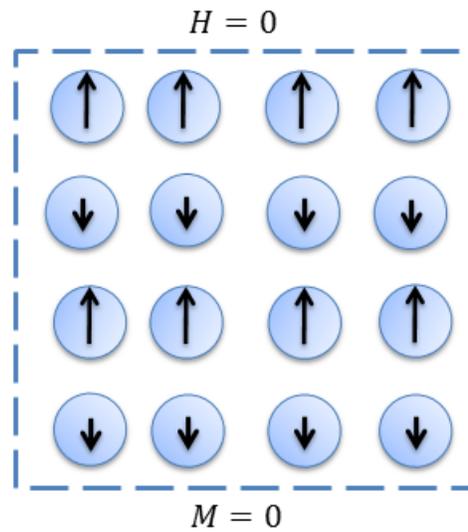
**Figura 2.3:** Esquema de la distribución de los 26 electrones del hierro. La tercera subcapa, denominada 3d, tiene 4 electrones desapareados, lo que origina sus propiedades magnéticas.

Los materiales antiferromagnéticos, entre los que podemos mencionar el NiO y FeO, presentan, a nivel atómico, un momento magnético neto, pero la interacción entre los momentos vecinos hace que se orienten antiparalelamente, generando dos subredes, cada una con una magnetización neta, ambas del mismo valor pero apuntando en direcciones opuestas (esto aplica en materiales con redes bipartitas). De esta forma, en ausencia de campo la magnetización neta de un material antiferromagnético es nula, pero en presencia de un campo externo evidencian un comportamiento similar a los paramagnetos con una susceptibilidad positiva ( $\chi > 0$ ). La Fig. 2.4 muestra el ordenamiento de los momentos en un antiferromagneto.



**Figura 2.4:** Configuración de los momentos magnéticos en un antiferromagneto. Su magnetización neta es nula en ausencia de campo externo.

Por último, los ferrimagnetos se ordenan en términos magnéticos formando dos redes antiferromagnéticas, pero el módulo del momento atómico de una red es mayor al de la otra, presentando una magnetización espontánea no nula (ver Fig. 2.5). Algunos ejemplos son la magnetita y el granate de hierro e itrio (YIG).



**Figura 2.5:** Configuración de los momentos magnéticos de un material ferrimagnético. En ausencia de un campo externo el material tiene magnetización espontánea no nula.

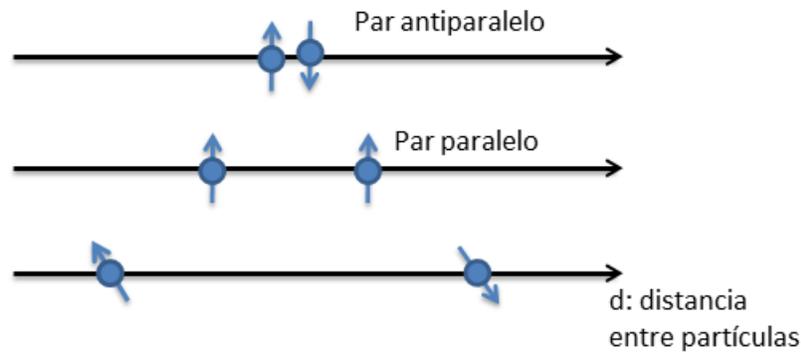
## 2.2. Energías asociadas a sistemas magnéticos

Los dominios magnéticos y otras configuraciones presentes en un material pueden ser comprendidas en términos del balance entre las energías magnéticas involucradas en el proceso de magnetización. De esta forma la comprensión de cada una de las contribuciones a la energía es esencial para la interpretación del comportamiento de un sistema. Es por ello que revisaremos los términos de energía relevantes en el proceso de magnetización de sistemas ferromagnéticos antes de profundizar acerca de la estructura de dominios.

### 2.2.1. Energía de Intercambio

En un material sólido, la razón de que los momentos de los átomos vecinos estén paralelos entre sí tiene su origen en la mecánica cuántica. Los orbitales electrónicos de los átomos o iones vecinos pueden solaparse, generando una interacción entre los

electrones. Esto da como resultado una interacción de intercambio interatómica que provoca que la energía total del cristal dependa de la orientación relativa de los espines localizados en los átomos vecinos. Esta es la mayor interacción magnética en los sólidos y es responsable de la orientación paralela o antiparalela de los momentos magnéticos, es decir ferromagnetismo y antiferromagnetismo, respectivamente. En definitiva, todo proviene del solapamiento de las funciones de onda de los átomos o iones vecinos y del principio de exclusión de Pauli. La función de onda electrónica está dada por el producto de dos funciones de onda, una que depende de la parte espacial y otra que depende del espín. Este acoplamiento impide que dos electrones con espines paralelos, o sea con una función de onda de espín simétrica, se aproximen. Pero si su función de onda de espín es antisimétrica (espines antiparalelos) pueden aproximarse. La Fig. 2.6 muestra un diagrama del espín de electrones vecinos, según la distancia entre ellos. Es importante mencionar que cuando ambos electrones están juntos, la magnetización neta de ese par es nulo.



**Figura 2.6:** Orientaciones permitidas para dos electrones según la distancia entre sí.

En un sistema de dos espines, la energía de intercambio se define como la diferencia de energía entre la configuración de espín paralela y antiparalela. Para un sistema de muchos electrones, la energía de intercambio se obtiene del valor esperado del Hamiltoniano de Heisenberg

$$E_{ex} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.3)$$

donde  $\vec{S}_i$  ( $\vec{S}_j$ ) es el momento angular del espín ubicado en el  $i$  ( $j$ )-ésimo sitio de la red y  $J_{ij}$  es la integral de intercambio que describe el acoplamiento entre dos momentos magnéticos. Por convención se utiliza un signo negativo delante de la expresión para la energía, de forma que un valor positivo de  $J_{ij}$  implica un acoplamiento ferromagnético que tiende a alinear los momentos magnéticos vecinos, mientras que un valor negativo implica un acoplamiento antiferromagnético.

### 2.2.2. Energía Dipolar

La energía dipolar, también conocida como magnetostática, considera la interacción entre un elemento magnetizado con el campo magnético generado por su propia magnetización, denominado campo demagnetizante. Tal como se mencionó previamente, el campo magnético total,  $\vec{H}$ , puede ser expresado como la suma de dos contribuciones, el campo externo aplicado  $\vec{H}_a$  y el campo debido a los momentos magnéticos del material, denominado campo demagnetizante  $\vec{H}_{dip}$ . Esta interacción dependerá de la posición de cada elemento magnético del sistema. El campo generado por el momento magnético  $j$  en la posición del momento  $i$  está dado por

$$\vec{H}_{dip} = \frac{3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_{ij})\hat{n}_{ij} - \vec{m}_j}{r_{ij}^3}. \quad (2.4)$$

De esta forma, la energía dipolar de interacción entre los momentos  $i$  y  $j$  es

$$E_{dip} = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{n}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (2.5)$$

donde  $r_{ij}$  es la distancia entre los momentos,  $\hat{n}_{ij}$  es el vector unitario en la dirección que conecta ambos momentos.

Si un material, debido a su geometría, tiene un eje preferencial, los momentos magnéticos se alinearán a lo largo de él. Es por esto que esta energía también es conocida como anisotropía de forma.

### 2.2.3. Energía de Anisotropía

Tal como sabemos, la interacción de intercambio no depende de la dirección de la magnetización en el material, siendo totalmente isotrópica. Sin embargo, si existe algún eje preferente, la magnetización minimizará la energía del sistema orientándose a lo largo de dicho eje, favoreciendo una mayor estabilidad del sistema, lo que hoy es fuertemente buscado para aplicaciones en dispositivos electrónicos y de almacenamiento de información. La mayoría de los materiales presenta estos ejes preferenciales, lo que se conoce como anisotropía magnetocristalina, y tiene su origen en la interacción espín-órbita de los electrones. La órbita de los electrones está ligada a la estructura cristalográfica y debido a su interacción, los espines prefieren alinearse a direcciones específicas. La energía de anisotropía da cuenta de la cantidad de energía necesaria para cambiar la orientación de la magnetización hasta una dirección diferente a la del o los ejes preferenciales. En base a la simetría del cristal es posible escribir una expresión fenomenológica para la anisotropía como una expansión en serie de potencias, en donde los coeficientes de la serie son determinados a partir de resultados experimentales.

#### Anisotropía Uniaxial

El tipo más común de anisotropía está conectado a la existencia de sólo una dirección fácil, y se conoce como anisotropía uniaxial. De esta forma, la densidad de energía de anisotropía,  $\omega_u$ , tendrá simetría de rotación con respecto al eje fácil y dependerá sólo de la orientación relativa de  $\vec{m}$  con respecto a este eje. Consideremos por simplicidad que la dirección del eje fácil en un cristal hexagonal es a lo largo del eje  $z$ . Así el único parámetro relevante es el ángulo  $\theta$  formado entre la magnetización y el eje  $z$ . Por tanto podemos expresar  $\omega_u$  como una función par de  $m_z = \cos\theta$ , usando el hecho de que  $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$  y que  $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$ . De esta forma

tenemos

$$\omega_u = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^6 \theta + \dots, \quad (2.6)$$

donde los coeficientes  $K_i$  son conocidos como constantes de anisotropía, toman valores extraídos de los experimentos, son dependientes de la temperatura y sus unidades son energía por unidad de volumen [ $J/m^3$ ]. Claramente si  $K_1 > 0$ , el eje fácil de la magnetización es a lo largo del eje  $z$ . Si  $K_1 < 0$ , la única manera de minimizar la energía es que la magnetización vaya al plano  $x - y$ , generando un plano fácil de magnetización.

### Anisotropía Cúbica

Esta anisotropía se caracteriza por la existencia de tres direcciones privilegiadas para la magnetización. La expresión para la densidad de energía de anisotropía cúbica,  $\omega_u$ , debe ser invariante ante la permutación de estos ejes cuando los ejes  $x, y, z$  se definen a lo largo de los ejes cristalográficos. Nuevamente consideramos sólo potencias pares y despreciamos el término de segundo orden  $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$ . De esta forma, la expansión comienza con términos de cuarto orden,

$$\omega_c = K_1(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + K_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2 + \dots, \quad (2.7)$$

donde los valores de  $K_1$  y  $K_2$  son también obtenidos de los resultados experimentales y dependen de la temperatura. Si bien esta expansión puede ser llevada a órdenes mayores, esto no es necesario para ningún material ferromagnético conocido. Considerando el menor orden de la expansión tenemos

$$\omega_c = K_1(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2). \quad (2.8)$$

Si  $K_1 > 0$  existen seis mínimos de energía equivalentes correspondientes a las direcciones  $x, y, z$  positivas y negativas. Si  $K_1 < 0$  hay ocho mínimos de energía que apuntan a los vértices de un cubo.

### 2.2.4. Energía de Zeeman

La energía de Zeeman representa la interacción entre los momentos magnéticos del material y el campo externo. La energía de interacción, considerando un sistema de  $N$  momentos magnéticos, está dada por

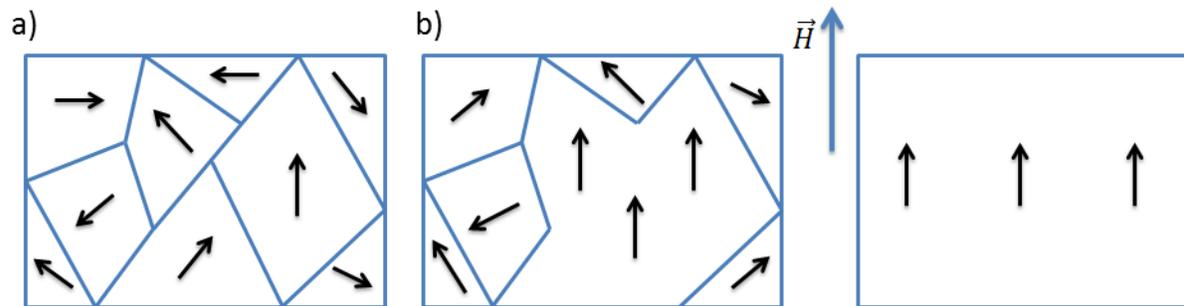
$$E_z = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_{ext}. \quad (2.9)$$

Esta energía es mínima cuando el momento magnético se orienta a lo largo de la dirección y sentido del campo aplicado.

## 2.3. Dominios magnéticos

En base a los argumentos entregados anteriormente, es esperable que un material ferromagnético tenga una magnetización permanente, a temperaturas inferiores a la temperatura crítica propia del material, debido a la fuerte interacción entre los momentos magnéticos vecinos. Sin embargo, sabemos que es posible demagnetizar un material ferromagnético. Las características de estos materiales están directamente ligadas a la formación, configuración y comportamiento de las regiones dentro del material con igual magnetización, es decir, los dominios magnéticos. El concepto de dominios magnéticos fue introducido por Pierre-Ernest Weiss en 1907 [22]. Weiss propuso la teoría de los dominios con el fin dar explicación al ferromagnetismo. De acuerdo a esta teoría, un sólido ferromagnético contiene una gran cantidad de pequeñas regiones espontáneamente magnetizadas y localmente saturadas, denominadas dominios. La dirección de la magnetización en cada dominio es al azar, de forma tal que la magnetización resultante en ausencia de un campo externo es nula. La formación de los dominios está relacionada con la minimización de la energía almacenada en el campo. Si bien un material ferromagnético presenta

una magnetización espontánea, en ocasiones es posible encontrarse con piezas ferromagnéticas que no presentan magnetización. Esto se debe a que si bien hay zonas en donde los momentos magnéticos están ordenados (dominios), este orden no se extiende a través de todo el material. Un material ferromagnético macroscópico puede estar formado por un gran número de dominios los que pueden estar orientados en diferentes direcciones. La Fig. 2.7a muestra un diagrama con dominios cuya magnetización está orientada al azar, lo que resulta en una magnetización nula (material demagnetizado). Tras someter el material a un campo externo, las regiones que albergan momentos magnéticos que tienen componente paralela al campo se expanden, a expensas de aquellas cuya magnetización es a lo largo de una dirección energéticamente menos favorable, tal como lo muestra la Fig. 2.7b.

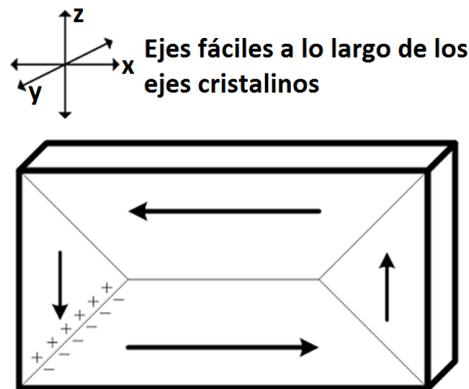


**Figura 2.7:** (a) Material ferromagnético con magnetización neta nula debido a la existencia de un gran número de dominios cuya magnetización está orientada al azar. (b) Crecimiento de dominios con el campo  $\vec{H}$ .

### 2.3.1. Estructura de Paredes de Dominio

La aparición de dominios y de paredes de dominio reduce la energía magnetostática de un sistema. Esto debido a que la formación de muchos dominios con diferentes orientaciones crea flujos cerrados dentro del material con el propósito de reducir el campo demagnetizante mediante la eliminación de los polos superficiales. Las paredes que están limitando estos dominios están definidas por una rotación gradual de los

espines a través de un cierto ancho de la pared. Esto es necesario para minimizar el costo energético debido a la energía de intercambio si la rotación fuese de  $180^\circ$  entre espines vecinos. La estructura típica para un dominio cerrado presente en un sistema con anisotropía cúbica se muestra en el diagrama de la Fig. 2.8.

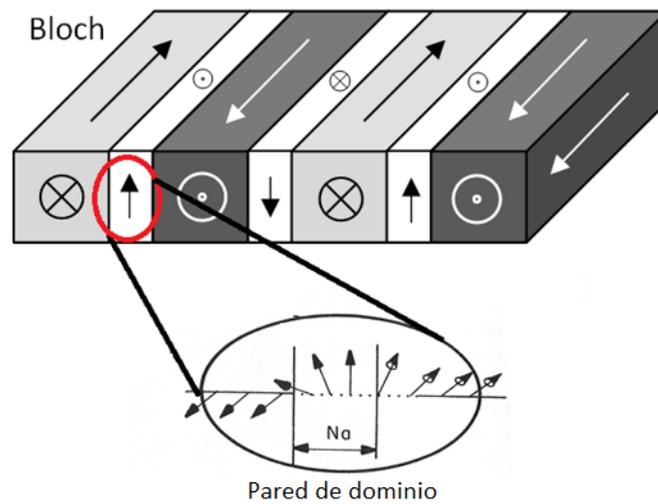


**Figura 2.8:** Patrón de dominio cerrado en un cristal magnético. Las cargas magnéticas de los polos superficiales en el borde del dominio muestran que habrá carga neta nula cuando haya un dominio cerrado.

### 2.3.2. Paredes de Bloch

Anteriormente mencionamos que una pared de dominio es una región que separa dos dominios magnéticos. Un ejemplo específico son las denominadas paredes de dominio de  $180^\circ$ . Estas paredes separan dominios en los que la dirección de la magnetización tiene una diferencia de  $180^\circ$  en su orientación, es decir, las magnetizaciones de los dominios son antiparalelas entre si. Consideremos un material magnético infinito con anisotropía uniaxial, que contiene dos dominios antiparalelos y entre ellos existe una pared de dominio cuya magnetización sale del plano de los dominios, tal como lo muestra la Fig. 2.9. Esta configuración de pared de dominio se denomina pared de Bloch. En este caso  $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ , pues no existe componente de la magnetización en la dirección  $x$ , y los espines en cada plano  $y - z$  son paralelos

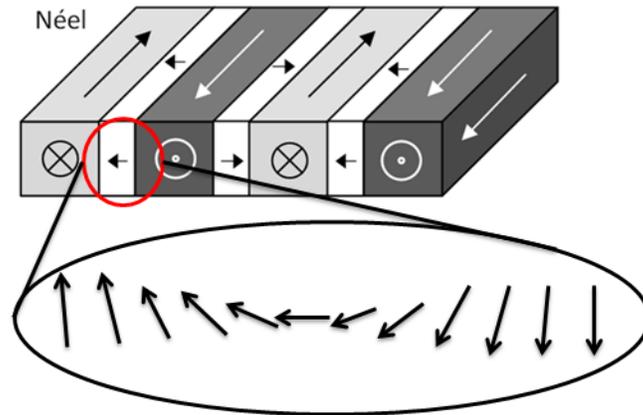
uno al otro. Como  $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ , no existe carga magnética y no hay fuentes de campo demagnetizante en la pared. El ancho de la pared de dominio está dado por un balance entre la energía de intercambio y la energía de anisotropía. La primera se minimiza cuando la pared es muy ancha, de forma que exista un ángulo muy pequeño entre las orientaciones de la magnetización de momentos magnéticos vecinos. Por otro lado, la energía de anisotropía se minimiza si todos los momentos magnéticos vecinos son paralelos al eje fácil, por lo que busca que el ancho de la pared sea pequeño.



**Figura 2.9:** Esquema de una pared de Bloch.

### 2.3.3. Paredes de Néel

Si consideramos películas magnéticas delgadas, la configuración de las paredes y los dominios puede ser muy diferente a una pared de Bloch, las que requieren un espesor mínimo para que el momento magnético se oriente perpendicular a la superficie. En películas magnéticas delgadas con un espesor comparable al ancho de la pared de Bloch, se genera una configuración diferente en la cual los momentos rotan en el plano de la superficie en lugar de hacerlo en el plano de la pared. Esta estructura es denominada *pared de Néel* (ver Fig. 2.10).



**Figura 2.10:** Esquema para una pared de Néel. Los momentos rotan paralelos a la superficie de la muestra.

#### 2.3.4. Paredes de $90^\circ$

Es importante mencionar que si bien generalmente la mayoría de las paredes de dominio puede ser del tipo  $180^\circ$  (Bloch y Néel) también es posible encontrar configuraciones del tipo  $90^\circ$ , en donde las direcciones de los momentos magnéticos en los dominios vecinos están en ángulo recto. Específicamente, en materiales cúbicos, es energéticamente favorable la formación de paredes de  $90^\circ$  debido a que la anisotropía cúbica asegura que las direcciones perpendiculares a la magnetización de un dominio determinado sean también ejes fáciles de magnetización. La Fig. 2.11 muestra un ejemplo de la formación de una pared de  $90^\circ$ .

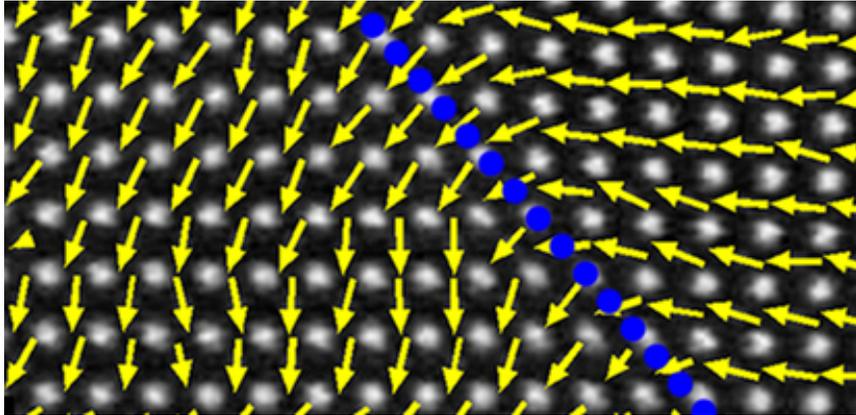
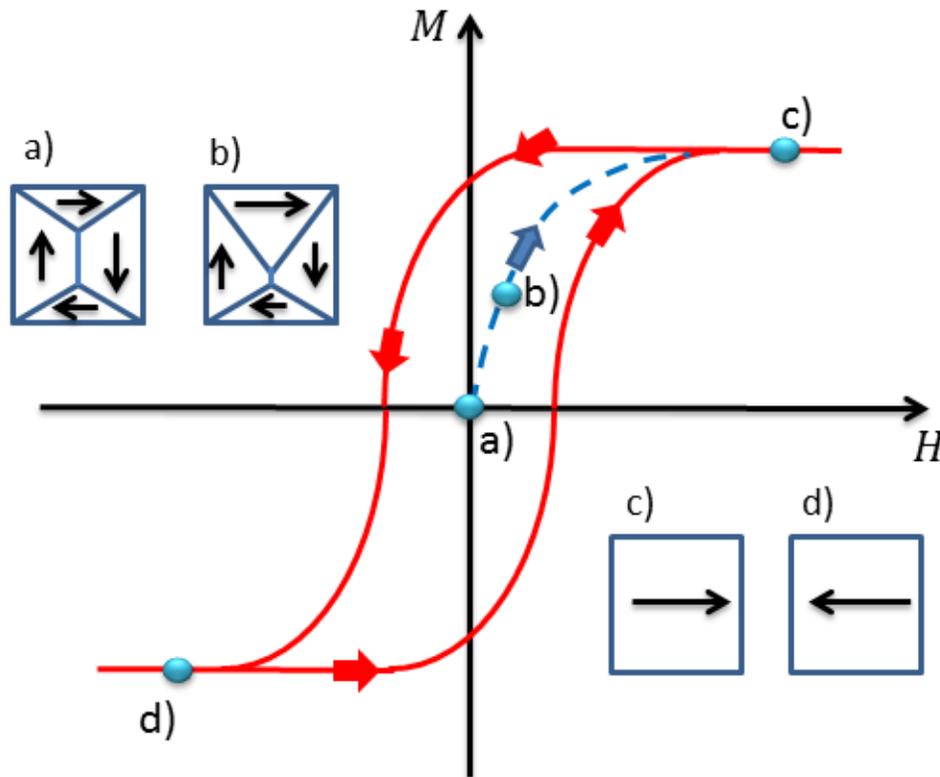


Figura 2.11: Esquema de una pared de dominio de  $90^\circ$ .

## 2.4. Histéresis magnética

Hemos evidenciado cómo la configuración de los dominios en el material es una resultante de la minimización de la energía almacenada en el campo. Pero también la estructura y distribución de los dominios está directamente ligada a la magnetización que pueda presentar una muestra tras encontrarse expuesta a un campo externo. Al medir la magnetización neta del material,  $M$ , a medida que cambia el campo externo  $H$  se obtiene una curva que caracteriza el material y que depende de su historia en términos magnéticos. La Fig. 2.12 muestra una curva de histéresis para un material ferromagnético. Tras aplicar un campo externo a una muestra inicialmente demagnetizada (a) se observa que algunos dominios aumentan su tamaño a medida que otros disminuyen (b) hasta que la muestra alcanza el punto de saturación,  $M_s$ , en donde todos los momentos apuntan en la dirección del campo (c). Si disminuimos el campo externo comienza el proceso de reversión en la muestra, para finalmente, llegar a la saturación (d). La curva desde el punto a-c se conoce como curva virgen mientras que la d-c-d se denomina curva de histéresis del material.



**Figura 2.12:** Diagrama de una curva de histéresis: Detalle de los cambios en los dominios y magnetización en el proceso de reversión.

## 2.5. Modos de reversión de la magnetización

La variación de la magnetización en función del campo externo ( $M$  vs  $H$  - curva de histéresis) es la técnica más utilizada para la caracterización de diferentes materiales magnéticos. Sin embargo, la complejidad del comportamiento magnético de un sistema puede requerir además de la observación directa de las configuraciones que adopta la magnetización durante el ciclo de histéresis.

Cuando el material se encuentra saturado (ver Fig. 2.12c) y comenzamos a disminuir la magnitud del campo externo, es posible evidenciar que el sistema, dependiendo de su geometría y material, revierte mediante diversos mecanismos

conocidos como modos de reversión. A continuación se detallan algunos de estos procesos de reversión.

### 2.5.1. Reversión coherente

Cuando un sistema adopta este tipo de reversión, evidencia un cambio gradual de la dirección a la que apuntan simultáneamente todos los momentos magnéticos de la estructura. Este tipo de reversión no se presenta en nanohilos dado que estos son muy largos, haciendo inviable energéticamente un proceso de reversión coherente [71]. La Fig. 2.13 muestra un diagrama de este tipo de reversión en un cilindro cuyo diámetro es comparable a su alto.

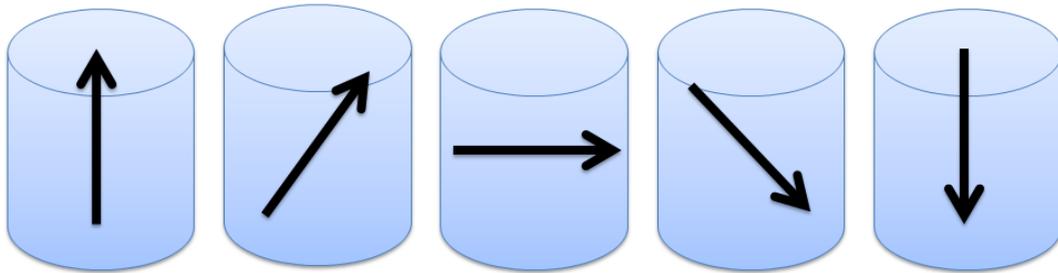
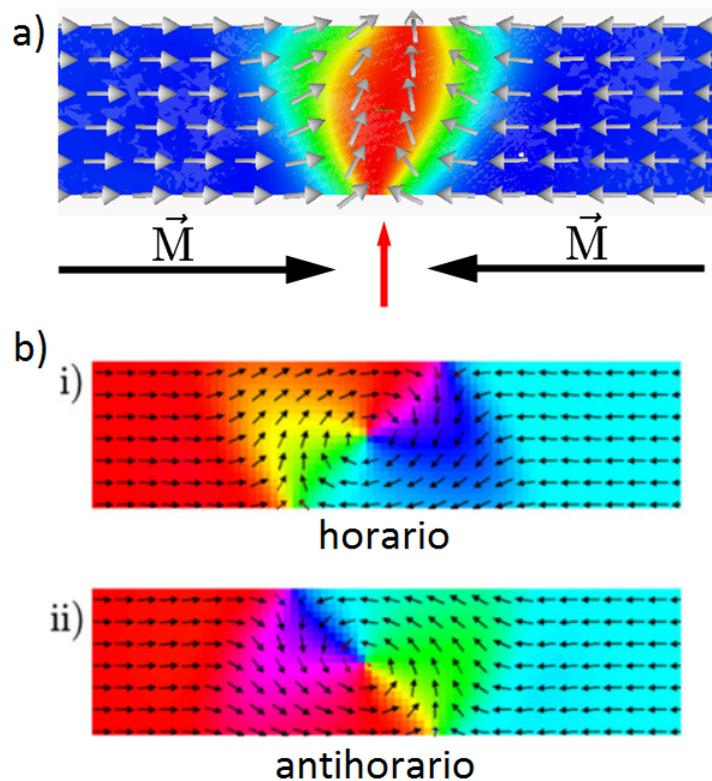


Figura 2.13: Diagrama de una reversión coherente.

### 2.5.2. Reversión mediante paredes de dominio

En sistemas de tamaño mayor a los 100 nm es frecuente encontrar reversiones mediante paredes de dominio. Para ellos se requiere de una longitud suficientemente larga que pueda alojar a un mínimo de dos dominios en algún momento, los que estarán separados por algún tipo de pared. Según sea la geometría y el material del sistema es posible observar diferentes tipos de paredes, las de Bloch, Néel, de  $90^\circ$  y  $180^\circ$  descritas previamente, y las paredes transversales y tipo vórtice [15, 33, 36] que se observan frecuentemente en estructuras con geometría cilíndrica y una longitud

mucho mayor que el radio [32, 47]. Específicamente, una pared transversal corresponde a una pared con una componente de la magnetización contenida en un plano perpendicular, por ejemplo, a la dirección de la magnetización en el eje fácil del elemento (ver Fig. 2.14a). Por otra parte una pared tipo vórtice tiene componente nula de la magnetización en el plano que la contiene, por ejemplo el plano perpendicular al eje de un hilo, y cuenta con un núcleo con magnetización fuera del plano (polaridad). La Fig. 2.14b muestra la presencia de dos vórtices con distinto sentido de giro. Es importante señalar que el sentido de giro de un vórtice se denomina quiralidad, el cual puede ser en sentido horario o antihorario.



**Figura 2.14:** Paredes de dominio en una cinta rectangular. (a) Estructura de la magnetización de una pared de dominio transversal. (b) Pared tipo vórtice con quiralidad en sentido (i) horario y (ii) antihorario.

## 2.6. Método de escalamiento

A continuación se describe el método utilizado para el estudio de los sistemas considerados en esta tesis. Estos están formados en general por del orden de  $10^7 - 10^9$  momentos magnéticos atómicos, etiquetados por  $N$ , lo que vuelve inmanejable cualquier descripción que minimice la energía del sistema como la suma de las energías individuales. Particularmente compleja resulta la incorporación de energías de largo alcance, como la dipolar, que conlleva un número de términos del orden de  $N^2$ , haciendo computacionalmente irrealizable la descripción magnética atómica del sistema. Todo lo anterior deja de manifiesto la importancia de disponer de una técnica que permita hacer los cálculos en tiempos computacionales razonables. El uso combinado de simulaciones de Monte Carlo con el método de escalamiento, a detallar a continuación, permite superar esta dificultad.

Este método fue propuesto el año 2002 por J. d'Albuquerque e Castro *et al.* [23], y a la fecha su validés ha sido ampliamente comprobada mediante un muy buen acuerdo con diversos resultados experimentales [44].

El método de escalamiento emerge del interés en obtener un diagrama de fase de las configuraciones de mínima energía de la magnetización de un cilindro de cobalto en función de su diámetro y su altura. Las configuraciones consideradas en el diagrama de fase son aquellas encontradas en experimentos desarrollados a partir del año 1995. Estas son un estado con magnetización en el plano del cilindro, un estado con magnetización perpendicular al plano del cilindro y una configuración del tipo vórtice. Para poder encontrar las dimensiones en las que se evidencian cada una de estas configuraciones, los autores propusieron escalar la constante de intercambio de la forma  $J' = \chi J$ , donde  $\chi$  es una constante menor que 1. Tras la obtención y análisis de los diagramas de fase obtenidos a partir de diferentes valores de  $\chi$ , se evidenció que todos ellos convergían a un solo diagrama de fase si se escalaban también las

dimensiones del cilindro, el largo  $L$  y diámetro  $d$ , de la forma

$$L' = \chi^\eta L, \quad (2.10)$$

$$d' = \chi^\eta d, \quad (2.11)$$

donde  $\chi$  es la constante de escalamiento y  $\eta \simeq 0.55$ . Estas relaciones de escalamiento permiten reducir el sistema original a un tamaño computacionalmente manejable pero lo suficientemente grande para conservar la complejidad física del sistema original, exhibiendo las mismas propiedades.

### 2.6.1. Simulación de Monte Carlo y algoritmo Metropolis

El método de Monte Carlo es una herramienta matemática con gran aplicabilidad en distintos campos de la ingeniería, medicina, economía y física, entre otros. Este método es empleado para explorar un espacio de fase mediante cambios aleatorios de sus parámetros, permitiendo así obtener una estadística de la variable de interés. Esta metodología de resolución fue desarrollada por John Von Neumann, Stanislaw Ulam y Nicholas Metropolis en la década de los años 40, con el objetivo de estudiar la difusión de neutrones en materiales para fusión nuclear [47]. Esta es una herramienta de aproximación estadística que intenta seguir las variaciones de un modelo para el cual su cambio o evolución no siguen un patrón estrictamente predefinido, sino de una manera estocástica, con dependencia en una secuencia de números aleatorios generados en la simulación. Tras utilizar una segunda secuencia de números aleatorios diferentes es posible obtener resultados acordes a los obtenidos con el primer grupo de números, pero con un error estadístico asociado.

En el año 1953, en el trabajo desarrollado por Nicholas Metropolis *et al.* se propuso un procedimiento muestral que permitía incorporar la variable temperatura [46]. El algoritmo Metropolis es un proceso gobernado por cadenas de Markov en el cual, mediante caminos aleatorios, la probabilidad de visitar un punto particular

es proporcional al factor de Boltzmann

$$P = \exp\left(\frac{-\Delta E}{K_B T}\right), \quad (2.12)$$

donde  $\Delta E$  es la diferencia de energía entre el penúltimo y último punto visitado,  $K_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del sistema.

Para el desarrollo de esta tesis, lo anteriormente expuesto es aplicado a los sistemas magnéticos estudiados mediante el siguiente procedimiento:

1. Consideremos un sistema formado por  $N$  momentos magnéticos dispuestos en los sitios atómicos de una red cristalina.
2. Se selecciona un momento magnético al azar, por ejemplo el momento magnético  $i$ , y se calcula la nueva energía de todo el sistema debido al cambio de un momento magnético  $E_1 = E(\vec{m}_i)$  en base a un modelo dado.
3. Se modifica la dirección del momento magnético  $i$  en un ángulo seleccionado al azar, y se calcula la nueva energía debido al cambio en el sistema, obteniendo  $E_2 = E(\vec{m}'_i)$ .
4. Se acepta el cambio de  $\vec{m}_i$  a  $\vec{m}'_i$  si la energía  $E_2 < E_1$ . Si resulta que  $E_2 > E_1$  el cambio es aceptado sí y sólo sí la probabilidad  $P > \varepsilon$ , donde  $\varepsilon$  es un número elegido aleatoriamente con un valor entre 0 y 1. Para cualquier otro caso el cambio no se acepta, conservando la dirección inicial de  $\vec{m}_i$ .

Esta metodología considera la definición de los denominados pasos de Monte Carlo (MCS). Un paso de Monte Carlo representa un número de selecciones aleatorias de la dirección de los momentos magnéticos igual al número  $N$  de momentos presentes en el sistema de interés. Como se ha indicado más arriba, la herramienta de simulación de Monte Carlo involucra un factor probabilístico que contempla la presencia de la temperatura en el sistema. Los sistemas estudiados en este trabajo se consideran a

temperatura ambiente ( $T = 300\text{ K}$ ). Es sabido que la temperatura puede influir en el sistema ocasionando fluctuaciones térmicas de los momentos magnéticos de tal forma que puede dificultar o posibilitar que el sistema sobrepase la barrera de energía entre un estado y otro. En base al método de escalamiento propuesto por d'Albuquerque e Castro *et al.* [23], al disminuir el tamaño del sistema, si se desea conservar las propiedades magnéticas, se debe escalar también la temperatura. Si bien la manera en que debe ser escalada la temperatura aún es foco de discusión, existen al menos un par de propuestas que permiten abordar el problema. En trabajos realizados por Bahiana *et al.* [8] se plantea que en la cercanía de cada mínimo local de energía las transiciones dependen de barreras de energía de la forma  $K_e V_e$ , donde  $K_e$  es la constante de anisotropía efectiva que considera la distribución de todos los tipos de energía presentes en el sistema y  $V_e$  es el volumen de la partícula. En base a esto, los autores propusieron que las transiciones que son activadas de manera térmica dependen de la temperatura de bloqueo  $T_B \propto K_e V_e$ . Esta expresión nos permite relacionar las dimensiones del sistema con la temperatura. Por tanto, si escalamos el sistema, se debe también escalar la temperatura de la siguiente forma

$$T' = \chi^{3\eta} T, \quad (2.13)$$

con  $\eta \approx 0.55$ .

La otra propuesta considera un escalamiento lineal de la temperatura, es decir,  $T' = \chi T$  [62].

### 2.6.2. Método de Fast Monte Carlo

Denominamos Fast Monte Carlo a la combinación del método de escalamiento descrito más arriba con el método de Monte Carlo. Dicha combinación fue propuesta por P. Vargas *et al.*, [64] mostrando un buen acuerdo con resultados experimentales, lo que ha validado este método usado ya por varios grupos en el mundo. Los

---

autores propusieron estudiar un problema estándar de magnetismo consistente en la determinación del tamaño máximo para el cual una partícula magnética cúbica con anisotropía uniaxial tenga como estado de menor energía un monodominio. Esto llevó a la validación del Método de Escalamiento en conjunto con simulaciones de Monte Carlo.

# Multi-estabilidad en nanoestructuras magnéticas de baja simetría

---

### 3.1. Introducción

Como se ha descrito previamente en esta tesis, a lo largo de las últimas décadas se ha brindado una fuerte atención al estudio de sistemas magnéticos nanoestructurados debido a su potencial para la producción de medios de grabación de alta densidad [7].

La estrategia usualmente adoptada considera la reducción del tamaño de los elementos de memoria, de forma de incrementar la densidad de información almacenada [38]. En general los estudios realizados han considerado partículas con alto grado de simetría, tales como discos [56] e hilos [20, 52]. Esta estrategia, sin embargo, se ha visto limitada por la inestabilidad térmica, la cual cobra más importancia a medida de que el tamaño del elemento de memoria se reduce, es decir, cuando nos acercamos al límite superparamagnético [40].

Un acercamiento alternativo es el de incrementar el número de estados magnéticos por elemento de memoria, de forma tal que, manteniendo el volumen fijo, sea posible

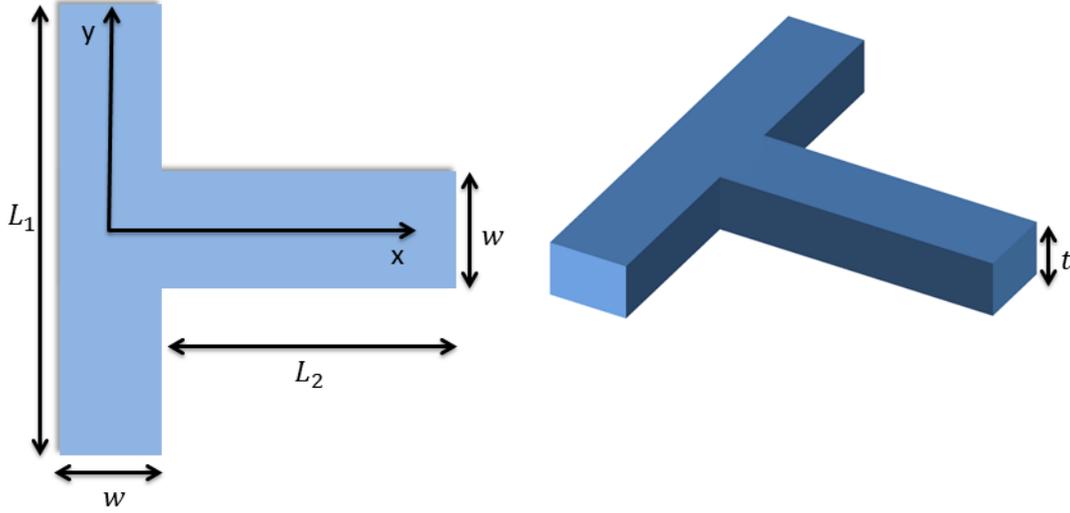
almacenar más de un bit. Para ello se han seguido dos rutas. Una de ellas considera el uso de multicapas, las que, a diferencia de un hilo por ejemplo, presentan más de dos configuraciones magnéticas de mínima energía [37, 72, 16, 18, 27, 48]. La otra ruta explora la llamada anisotropía configuracional, considerando partículas de diferentes formas con alta simetría. Algunos ejemplos son los triángulos [21, 60], cuadrados [21, 12, 65] y pentágonos [21], los que exhiben una simetría de orden seis, cuatro y diez, respectivamente. Pero desde el punto de vista de su uso como elementos de memoria es necesario responder dos preguntas fundamentales. La primera concierne a la estabilidad de los estados de equilibrio, es decir, el costo de energía para ir de un estado a otro, lo cual puede resultar en pérdidas de información si este costo es pequeño. La segunda se refiere a la sensibilidad de los estados de equilibrio frente a imperfecciones estructurales tales como rugosidad, siempre presentes en los sistemas nanoestructurados.

En este capítulo abordamos un acercamiento diferente, y consideramos los estados de equilibrio de partículas de baja simetría, las que presentan una fuerte anisotropía configuracional. Mediante un estudio sistemático de los modos de reversión analizamos los estados estables del sistema así como su sensibilidad frente a la rugosidad, buscando motivar el estudio de estos sistemas, en general olvidados frente a los de mayor simetría.

El sistema que hemos analizado son estructuras tipo T, las que describimos a continuación. Utilizando el método de Monte Carlo mostramos que estas estructuras presentan estados de equilibrio bien definidos, estables frente a la presencia de rugosidad.

## 3.2. Modelo teórico

Los elementos tipo T que hemos estudiado se representan esquemáticamente en la Fig. 3.1 y tienen dimensiones  $t = 10$  nm,  $w = 40$  nm,  $L_1 = 250$  nm y  $L_2 = 210$  nm.



**Figura 3.1:** Representación esquemática de una nanopartícula con forma de T.

Cada estructura está compuesta por momentos magnéticos  $\mu = 2.2 \mu_B$  dispuestos en una estructura bcc orientada en la dirección (100) con constante de red  $a_0 = 2.8 \text{ \AA}$ . La constante de intercambio entre primeros vecinos,  $J$ , se considera de 40 meV. Estos valores corresponden aproximadamente a los de hierro [39]. Para una configuración dada de los momentos magnéticos  $\{\vec{\mu}_i\}$  la energía del sistema está dada por

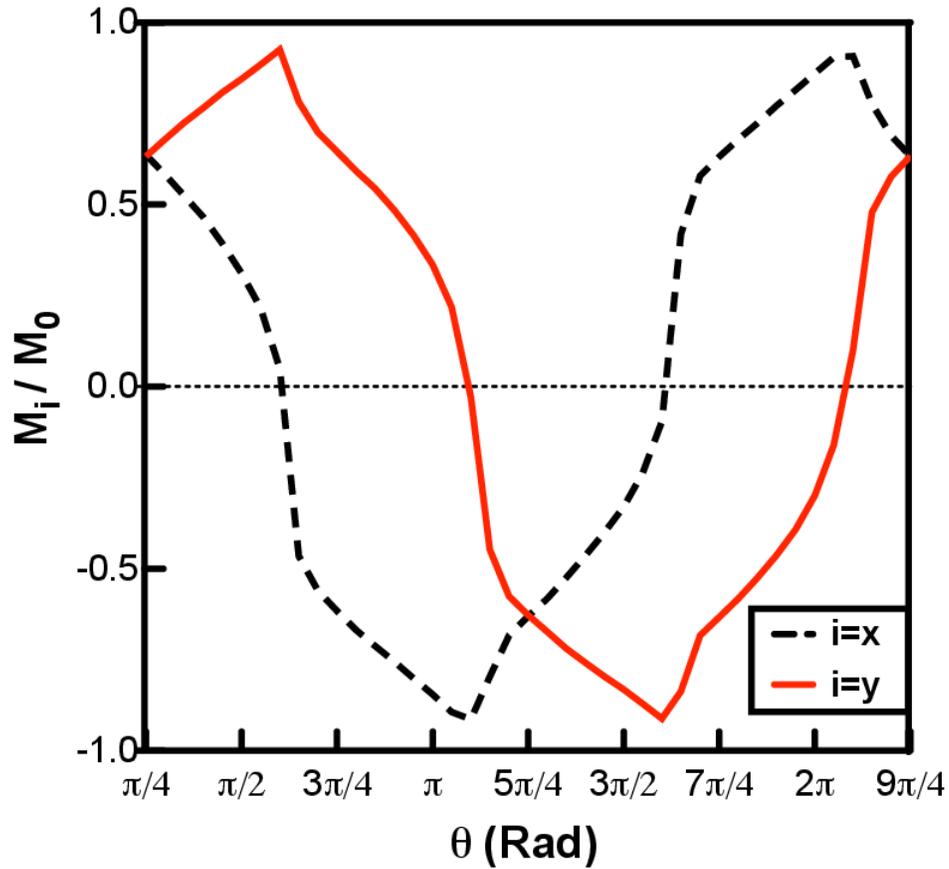
$$E = -\vec{H} \cdot \sum_i^N \vec{\mu}_i - J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + \sum_{i>j}^N \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{n}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (3.1)$$

donde  $\langle ij \rangle$  indica que la suma se realiza sobre todos los pares de primeros vecinos en el sistema, mientras que el término dipolar considera la contribución de todos los pares de momentos magnéticos. En esta ecuación  $r_{ij}$  representa la distancia entre los átomos magnéticos  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo y  $\hat{n}_{ij}$  es el vector unitario paralelo a  $\vec{r}_{ij}$ . En este estudio no se considerará anisotropías asumiendo una muestra policristalina.

Es importante destacar que el número de momentos magnéticos en cada partícula con forma de T es del orden de  $10^7$ , lo cual es tres órdenes de magnitud mayor que lo que podemos considerar en un cálculo de tipo Monte Carlo que incluya interacciones dipolares entre todos los pares de momentos magnéticos. Para resolver esta dificultad adoptamos el procedimiento que combina el método de Monte Carlo junto con la técnica de escalamiento introducida en el capítulo anterior [23]. Mediante una elección adecuada del valor del parámetro  $\chi$ , el tamaño del sistema escalado puede ser reducido de forma de hacer posible cálculos de Monte Carlo. En este trabajo se utilizó  $\chi = 0.002$  y  $\eta = 0.55$ , lo que nos llevó a considerar un número de partículas  $N' = 2072$ . La temperatura usada es  $T = 300 K$

### 3.3. Resultados

Comenzamos estudiando mirando la respuesta magnética del elemento ante un campo rotatorio  $\vec{H}$  de magnitud 4.0 kOe, aplicado en el plano  $x$ - $y$ . Nuestro acercamiento es similar al adoptado por Thevenard *et al.* [60] para investigar los efectos de la anisotropía configuracional sobre las propiedades magnéticas de nanopartículas. La orientación del campo magnético varía en pasos de  $\delta\theta = \pi/20$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre  $\vec{H}$  y el eje  $x$ . Para cada valor de  $\theta$ , el sistema se mantiene bajo el campo  $\vec{H}$  por un período de tiempo equivalente a 15.000 pasos de Monte Carlo. La Fig. 3.2 muestra la magnetización reducida  $m_x = M_x/M_0$ , con una línea punteada, y  $m_y = M_y/M_0$ , con una línea sólida, en función del ángulo  $\theta$ .  $M_0$  es el momento magnético total de un elemento saturado, y  $M_x$  y  $M_y$  son las componentes  $x$  e  $y$  del momento magnético total, respectivamente.

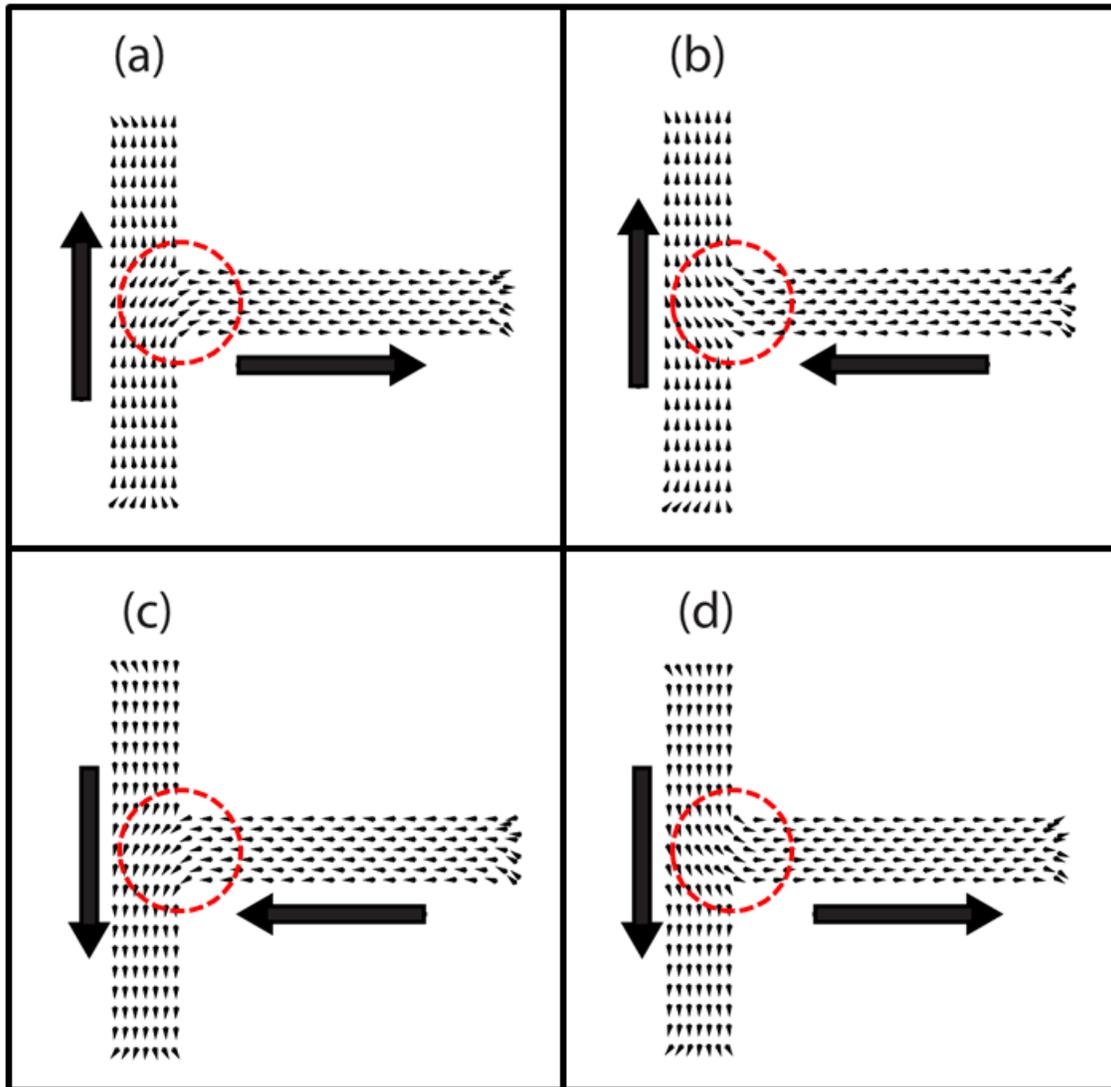


**Figura 3.2:** Dependencia angular de las componentes normalizadas  $m_x$  y  $m_y$  respecto de la orientación del campo rotatorio externo.

Es necesario enfatizar que los resultados en la Fig. 3.2 corresponden al estado con campo magnético, no en remanencia. Si nos enfocamos en los resultados para  $\theta = \pi/4$  encontramos que  $m_x = m_y$ , lo que significa que  $\vec{M}$  apunta en la dirección [1,1] en el plano  $x$ - $y$ , lo que corresponde a la configuración (a) en la Fig. 3.3. Es decir, las dos secciones del sistema tienen su magnetización saturada a lo largo de la dirección de mayor longitud, con una pared de  $90^\circ$  en la sección compartida por ambos segmentos de la estructura. A medida que  $\theta$  aumenta se puede observar una disminución gradual de  $m_x$  y un aumento gradual de  $m_y$  hasta que  $\theta$  alcanza el valor infinitesimalmente menor que  $\pi/2$ . Luego, a partir de  $\pi/2$  ocurre una rápida variación de  $m_x$ , que cambia

de signo. Esto es consistente con que el sistema va desde la configuración (a) a la configuración (b) descrita en la Fig. 3.3, en la cual  $m_x$  es negativa y  $m_y$  es positiva. Aumentos posteriores de  $\theta$  resultan en una reducción gradual de ambas componentes hasta que  $\theta$  alcanza el valor  $\pi$ , donde ocurre una rápida variación de  $m_y$ , cambiando su signo de positivo a negativo. Tal comportamiento es consistente con una transición del sistema desde la configuración (b) a la configuración (c) en la Fig. 3.3. Ambas componentes permanecen negativas hasta que  $\theta$  alcanza el valor  $3\pi/2$ , cuando  $m_x$  cambia a valores positivos, indicando el paso del sistema de la configuración (c) a la configuración (d). Finalmente, cuando  $\theta$  pasa por el valor  $2\pi$ ,  $m_y$  cambia rápidamente a valores positivos, llevando al sistema de vuelta a la configuración (a).

Estos resultados muestran que el sistema exhibe cuatro configuraciones magnéticas, como las muestra la Fig. 3.3 denotadas por (a), (b), (c) y (d), en las cuales la magnetización total apunta en las direcciones  $[1,1]$ ,  $[-1,1]$ ,  $[-1,-1]$  y  $[1,-1]$ , respectivamente.



**Figura 3.3:** Representación esquemática de las cuatro configuraciones de equilibrio del elemento tipo T. El círculo rojo muestra la pared de dominio entre ambas secciones de la estructura.

Los rápidos cambios que ocurren en las componentes de la magnetización cuando el sistema va de una configuración a otra señalan el cruce de las barreras de energía que separan estos estados. La magnitud relativa de tales barreras puede ser estimada determinando el mínimo valor del campo magnético  $H$  que lleva a un sistema de una

configuración a otra. Para obtener estos campos realizamos el siguiente proceso:

1. El sistema en la configuración inicial, digamos la (a), se somete a un campo magnético a lo largo de la configuración final, digamos la (c).
2. El sistema se mantiene en dicha condición por  $2 \times 10^6$  pasos de Monte Carlo.
3. El campo se remueve y se deja relajar el sistema por  $2 \times 10^6$  pasos de Monte Carlo.
4. Si luego de este proceso el sistema no alcanza la configuración final, la intensidad del campo se aumenta y se repite el proceso sucesivamente hasta que el sistema logre llegar a la configuración final.

Siguiendo este procedimiento logramos determinar el campo magnético  $H_t$  y  $H_t/\mu$  asociados con la transición entre todos los pares de estados que se muestran en la Fig. 3.3. Es importante destacar que, debido a la simetría, algunas transiciones son equivalentes. Los resultados, en unidades de kOe, se muestran en la Tabla 3.1. Los valores en la tercera columna representan los campos críticos normalizados a la magnetización de saturación por átomo.

**Tabla 3.1:** Campos magnéticos  $H_t$  y  $H_t/\mu$  asociados con la transición entre los estados descritos en la Fig. 3.3.

Transición	$H_t(\text{kOe})$	$H_t/\mu(\text{kOe}/\mu_B)$
a $\Leftrightarrow$ b c $\Leftrightarrow$ d	$1.36 \pm 0.01$	$0.62 \pm 0.01$
a $\Leftrightarrow$ c b $\Leftrightarrow$ d	$1.50 \pm 0.01$	$0.68 \pm 0.01$
a $\Leftrightarrow$ d b $\Leftrightarrow$ c	$1.39 \pm 0.01$	$0.63 \pm 0.01$

La magnitud de los campos de transición en la Tabla 3.1, similar a los campos encontrados en diversas propuestas de sistemas de grabación [60], indica que las cuatro configuraciones de equilibrio que hemos encontrado son estables, y ofrecen una alternativa real para grabación de información. La estabilidad de las configuraciones resulta de la fuerte anisotropía configuracional que está asociada con la reducida simetría de cada elemento con forma de T.

Es interesante comparar la magnitud de los campos de transición que hemos encontrado con el de una barra de largo  $L_1 + L_2 = 460$  nm, ancho  $w = 40$  nm, y espesor  $t = 10$  nm, esto es, con el mismo número de átomos que nuestro elemento con forma de T y la misma área. El campo requerido para que la magnetización de la barra cambie de un estado a otro de mínima energía es de 1.73 kOe, es decir, es del mismo orden de magnitud de los campos críticos de los elementos tipo T. Sin embargo, estos últimos pueden almacenar dos bits de información, en comparación a la barra que sólo puede almacenar uno.

Un aspecto fundamental es estudiar la sensibilidad de la magnetización de los elementos tipo T respecto de pequeñas imperfecciones, tales como rugosidad, que siempre están presentes en sistemas reales. Para simular tal situación removemos un 3 % de los momentos magnéticos de la superficie de la partícula aleatoriamente, y los disponemos, también en posiciones aleatorias, en la superficie. Esto representa la introducción de alrededor de un 6 % de rugosidad en cada elemento. Luego sometemos esta estructura rugosa a un campo rotatorio y observamos el comportamiento de  $m_x$  y  $m_y$  como función del ángulo de rotación del campo. Los resultados son indistinguibles de aquellos reportados en la Fig. 3.2.

También buscamos los campos de transición que permiten pasar de un estado estable a otro, utilizando el procedimiento descrito más arriba. Los resultados se muestran en la Tabla 3.2. Los valores promedio de cinco configuraciones diferentes de rugosidad difieren de aquellos en ausencia de rugosidad por un factor menor que

el 6 %, como se muestra en la Tabla 3.2

**Tabla 3.2:** Campos de transición promedio  $H_t$  y  $H_t/\mu$  correspondientes a las transiciones entre estados descritos en la Fig. 3.3 en presencia de rugosidad.

con rugosidad		
Transición	$H_t(\text{kOe})$	$H_t/\mu(\text{kOe}/\mu_B)$
a $\Leftrightarrow$ b	$1.37 \pm 0.05$	$0.62 \pm 0.05$
a $\Leftrightarrow$ c	$1.41 \pm 0.08$	$0.64 \pm 0.05$
a $\Leftrightarrow$ d	$1.37 \pm 0.06$	$0.62 \pm 0.05$

En suma, los sistemas tipo T exhiben cuatro estados de equilibrio en los cuales se observan secciones con magnetizaciones perpendiculares separadas por una pared de dominio.

La estabilidad de estos estados, estimada calculando la magnitud de los campos magnéticos necesarios para llevar al sistema de un estado a otro, muestra que el sistema es estable a temperatura ambiente, como consecuencia de la fuerte anisotropía configuracional presente en el sistema.

La introducción de defectos en la estructura no tiene mayor impacto en los campos de transición ni en los estados de mínima energía. Estas características brindan a las estructuras tipo T un gran potencial para aplicaciones tecnológicas. Más aún, permiten abrir la exploración de estructuras de baja dimensión que son escasamente estudiadas, y que pueden ser muy relevantes en el ámbito de grabación de información.

- ◆ Los resultados presentados han sido publicados en la referencia “Multi-stability in low-symmetry magnetic nanoparticles”, R. A. Escobar, S. Castillo-Sepúlveda, S. Allende, D. Altbir, M. Bahiana and J.d Albuquerque e Castro. *Journal of Applied Physics* **117**, 223901, (2015).

- 
- También han dado origen a una solicitud de patente PCT presentada en Chile ante el INAPI (Instituto Nacional de Propiedad Intelectual) el 12 de Diciembre de 2014 con el número asignado 3384-2014. Esta solicitud de patente protege el uso de estos sistemas de baja simetría para grabación de información.

# Modos de reversión de nanoestructuras de baja dimensión

---

## 4.1. Introducción

En términos generales, los procesos de reversión de la magnetización de diferentes nanoestructuras involucran la formación de estructuras tales como paredes de dominio, vórtices y antivórtices dentro de las partículas. Por su gran interés básico, así como por su potencial para grabación de información, estos procesos han sido intensamente estudiados en sistemas tales como dots [56], hilos [20, 29], tubos [52], y otros, utilizando diversos métodos, tales como cálculos teóricos, simulaciones micromagnéticas [66, 51], y simulaciones tipo Monte Carlo [28, 24].

A pesar del significativo progreso obtenido en la comprensión de los modos de reversión de la magnetización en diversas nanoestructuras, algunos aspectos permanecen aún sin clarificarse. Esto incluye, por ejemplo, determinar los requisitos para la formación de una u otra estructura durante la reversión y la forma en que diferentes estructuras se propagan.

También se ha desarrollado gran interés en abordar la relación entre el proceso

de reversión y la simetría de la partícula [70, 26, 69, 62]. Sin embargo los modos de reversión de estructuras de baja dimensionalidad que, como se verá más adelante son mucho más complejos que los que presentan estructuras con alta simetría, han sido mucho menos estudiados a la fecha.

En la búsqueda de aportar a la comprensión de estos sistemas hemos desarrollado detalladas simulaciones numéricas de los modos de reversión en las estructuras tipo T presentadas en el capítulo 3, para diferentes direcciones del campo magnético. Las partículas que hemos considerado están representadas en la Fig. 3.1, pero en orden a tener mayor información consideraremos dos geometrías. Hemos aplicado campos paralelos y perpendiculares al eje de simetría de la estructura, e identificaremos puntos especiales en la curva de histéresis asociados con la ocurrencia de eventos que involucran la formación, aniquilación e interacción entre paredes de dominio, vórtices y antivórtices.

Asumiendo que una estructura tiene  $N$  átomos en las posiciones  $\{\vec{R}_i\}$ , su energía estará dada por la Ec. 3.1. Sin embargo, y dado el número de átomos del sistema debemos hacer uso del Método de Escalamiento para hacer nuestros cálculos compatibles con los tiempos computacionales actuales.

## 4.2. Modelo teórico

El primer caso que estudiaremos considera estructuras con un espesor  $t = 10$  nm y ancho  $w = 80$  nm. A diferencia del sistema estudiado en el Capítulo 3, este mayor ancho permite estudiar una reversión más rica en estructuras, como se verá más adelante. Los largos de las barras horizontales y verticales son  $L_1 = 250$  nm y  $L_2 = 170$  nm, respectivamente.

Para este estudio elegimos los mismos factores de escalamiento que en el Capítulo

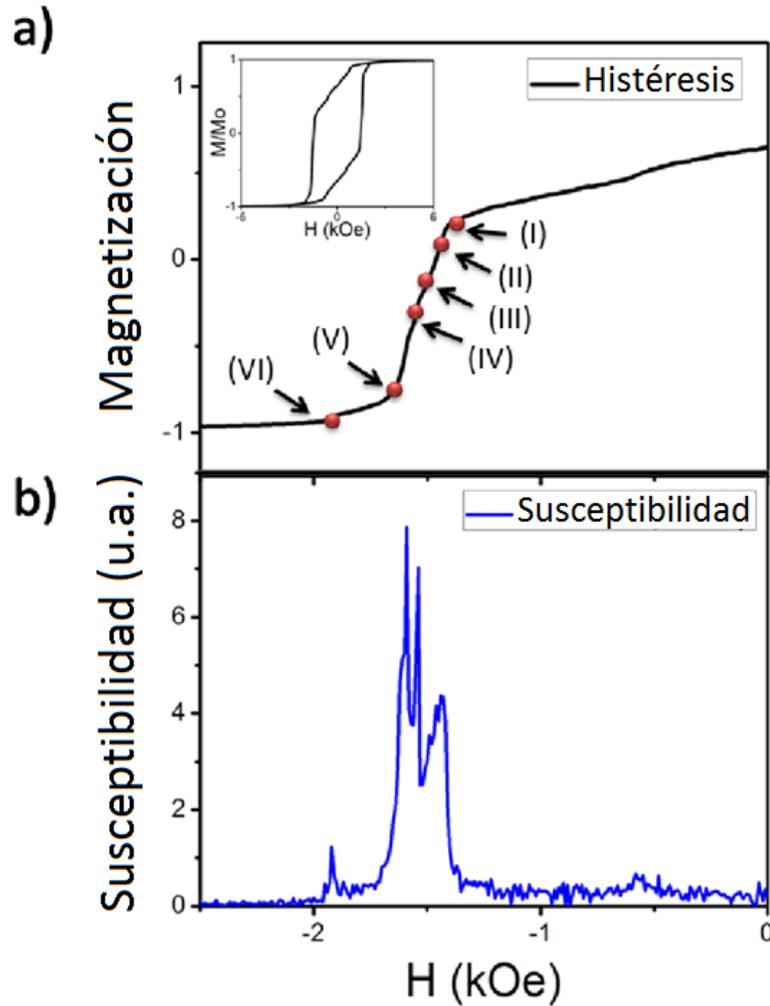
3,  $\chi = 0.002$  y  $\eta = 0.55$ , de forma que la constante de intercambio escalada  $J'$  es igual a 0.08 meV. Las simulaciones de Monte Carlo se realizaron a una temperatura escalada equivalente a  $T = 300$  K. En este estudio se consideraron dos procesos de reversión, uno en el cual la partícula está inicialmente magnetizada en la dirección  $x$ , y otro en el cual la magnetización inicial está a lo largo de la dirección  $y$ . Las curvas de magnetización fueron obtenidas de acuerdo al siguiente procedimiento:

- Comenzamos con la partícula saturada, con magnetización de saturación  $M_s$ , en presencia de un campo magnético externo  $H = 7.0$  kOe.
- Para obtener la curva de histéresis, la magnitud del campo se varía en pasos de  $\Delta H = 0.01$  kOe, de forma que se requieren 1403 pasos para obtener la curva de histéresis completa.
- Para cada valor de  $H$ , el valor correspondiente de la magnetización normalizada  $m = M/M_s$  se determina luego de 3500 pasos de Monte Carlo (MCS). Estos números aseguran convergencia a los valores de la coercividad.
- Este proceso se repite para 10 semillas diferentes, obteniendo promedios para la curva de histéresis.

### 4.3. Resultados

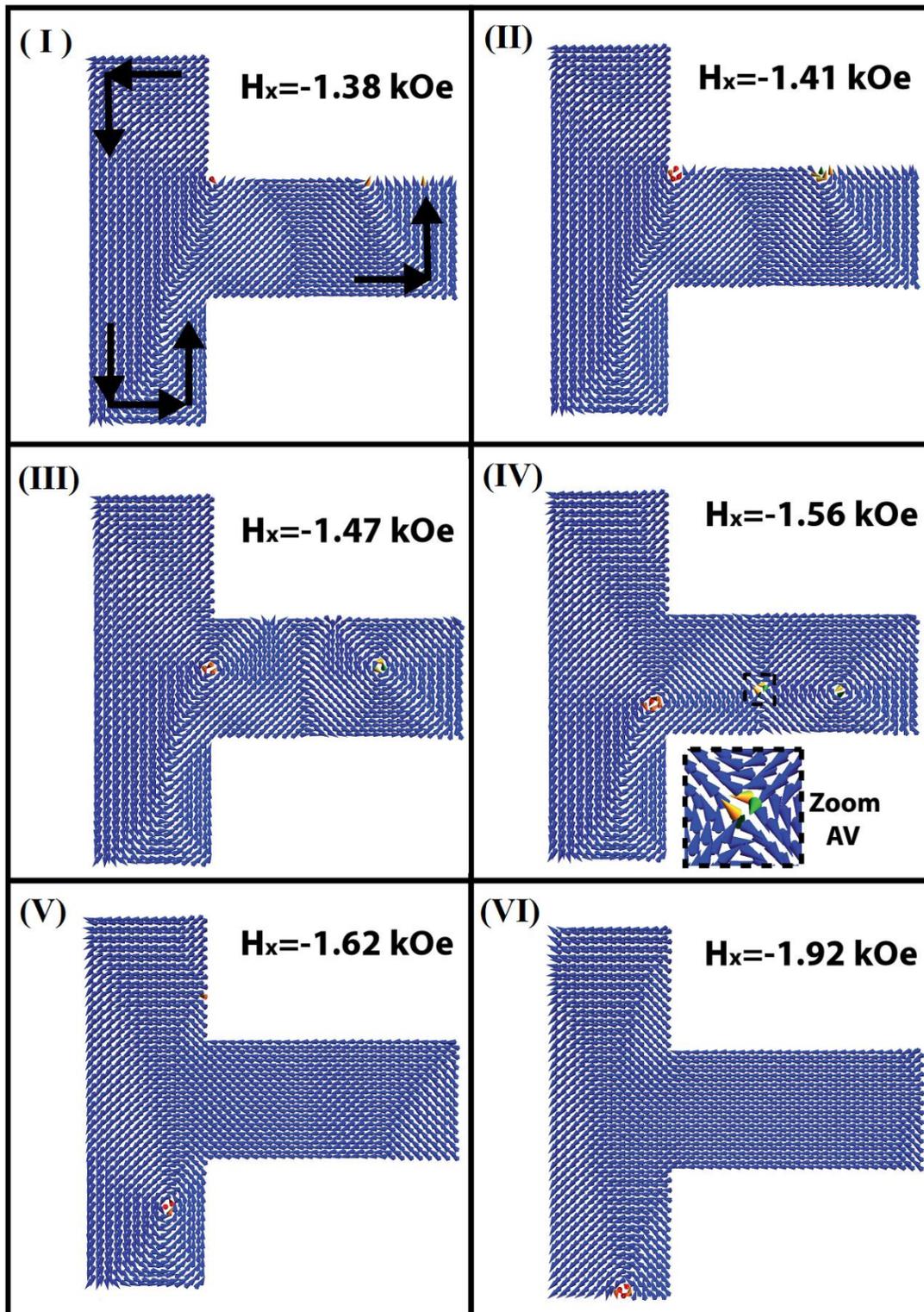
La Fig. 4.1 muestra el comportamiento de la magnetización normalizada (Fig. 4.1a) y de la susceptibilidad  $\chi = dm/dH$  (Fig. 4.1b) en la vecindad del campo coercitivo, para  $H$  paralelo al eje  $x$ . El recuadro inserto en la Fig. 4.1a exhibe la curva de histéresis completa. En la curva de susceptibilidad notamos la existencia de peaks pronunciados, evidenciando que el sistema atravieza estados en los cuales la magnetización cambia muy rápidamente con el campo  $H$ . Hemos identificado seis de

estos estados, los cuales se indican mediante puntos en la curva de la magnetización numerados del (I) al (VI).



**Figura 4.1:** Curvas de magnetización y susceptibilidad alrededor del campo coercitivo, para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $x$ . El recuadro inserto muestra la curva de histéresis completa. Los puntos rojos sobre la curva de magnetización indican el paso del sistema a través de los estados en los que la susceptibilidad varía rápidamente.

Con el propósito de comprender la naturaleza de estos estados, hemos observado la configuración de los momentos magnéticos a lo largo del proceso de reversión. Los resultados se presentan en la Fig. 4.2 a continuación.



**Figura 4.2:** Imágenes de la configuración de los momentos magnéticos en los estados indicados por los círculos rojos sobre la curva en la Fig. 4.1. Las flechas indican la presencia de dos paredes de tipo  $90^\circ$  y una pared de tipo  $180^\circ$ .

El proceso de reversión comienza con una reducción gradual en la magnetización, la cual es resultado de la formación de las paredes de dominio (DWs). La situación se ilustra en la Fig. 4.2–I, para un campo  $H = -1.38$  kOe, en el cual es posible identificar claramente dos paredes de  $90^\circ$  y una de  $180^\circ$ .

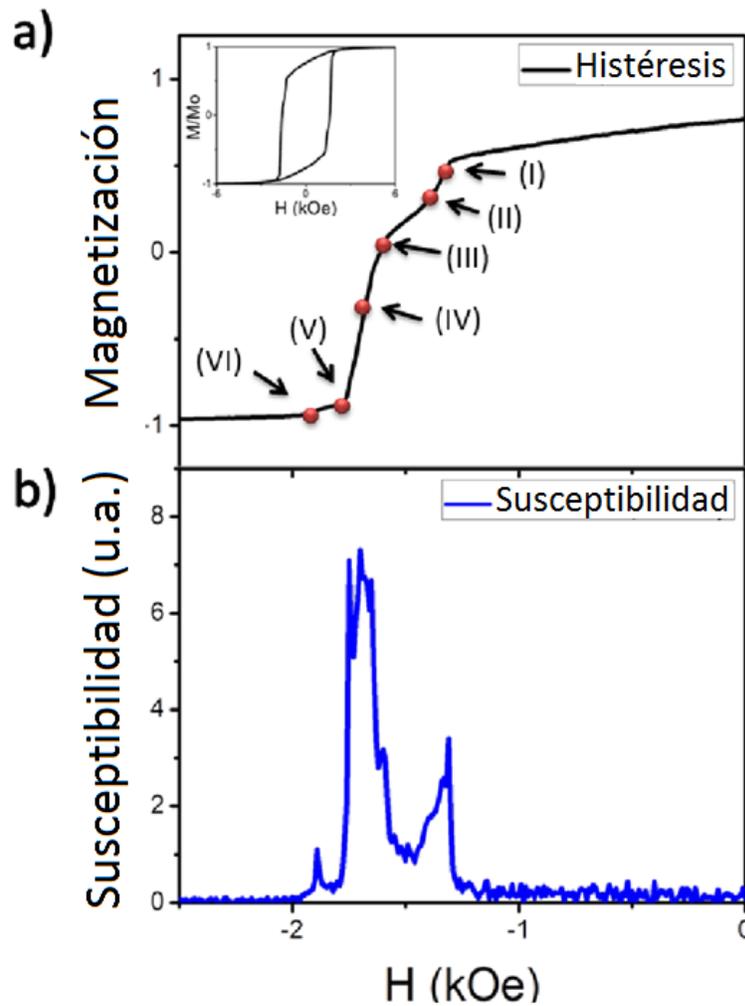
En este punto, dos vórtices con igual quiralidad comienzan a nuclear en el borde superior del segmento  $L_2$ , justo en la región en que las paredes de dominio tocan el borde. La formación de estos vórtices da lugar a un cambio más rápido en la magnetización, el cual se caracteriza por un incremento en la pendiente de la curva de magnetización y por máximos en la curva de susceptibilidad (Fig. 4.1).

A un valor dado de campo,  $H = -1.41$  kOe, ambos vórtices comienzan a desplazarse hacia el interior de la partícula a lo largo de las paredes de dominio (ver Fig. 4.2–II), llegando a la mitad del segmento a un campo  $H = -1.47$  kOe. A medida que continua el proceso de reversión en el sistema, ambos vórtices forman un antivórtice, tal como se muestra en la Fig. 4.2–IV, para  $H = -1.56$  kOe. Al aumentar la magnitud de  $H$  en la dirección negativa, tanto el antivórtice como uno de los vórtices en la barra  $L_2$  comienzan a descender y salen del sistema, quedando así sólo un vórtice en la barra  $L_1$ . Esta situación es detallada en la Fig. 4.2–V, a un valor de campo  $H = -1.62$  kOe. El proceso de reversión concluye efectivamente cuando el único vórtice presente deja el sistema tras alcanzar el borde inferior de la barra  $L_1$  cuando  $H = -1.92$  kOe (ver Fig. 4.2–VI).

La complejidad del proceso de reversión recién descrito está íntimamente relacionada a la baja simetría del sistema en estudio. Con el objetivo de esclarecer este punto hemos analizado también el proceso de reversión a lo largo de la dirección  $y$ , con respecto al cual la partícula no tiene simetría alguna. La Fig. 4.3 presenta las correspondientes curvas de magnetización (Fig. 4.3a) y susceptibilidad (Fig. 4.3b) en función del campo aplicado. Al igual que en el caso anterior, el recuadro inserto en la Fig. 4.3 muestra el ciclo de histéresis completo. También en este caso, la

---

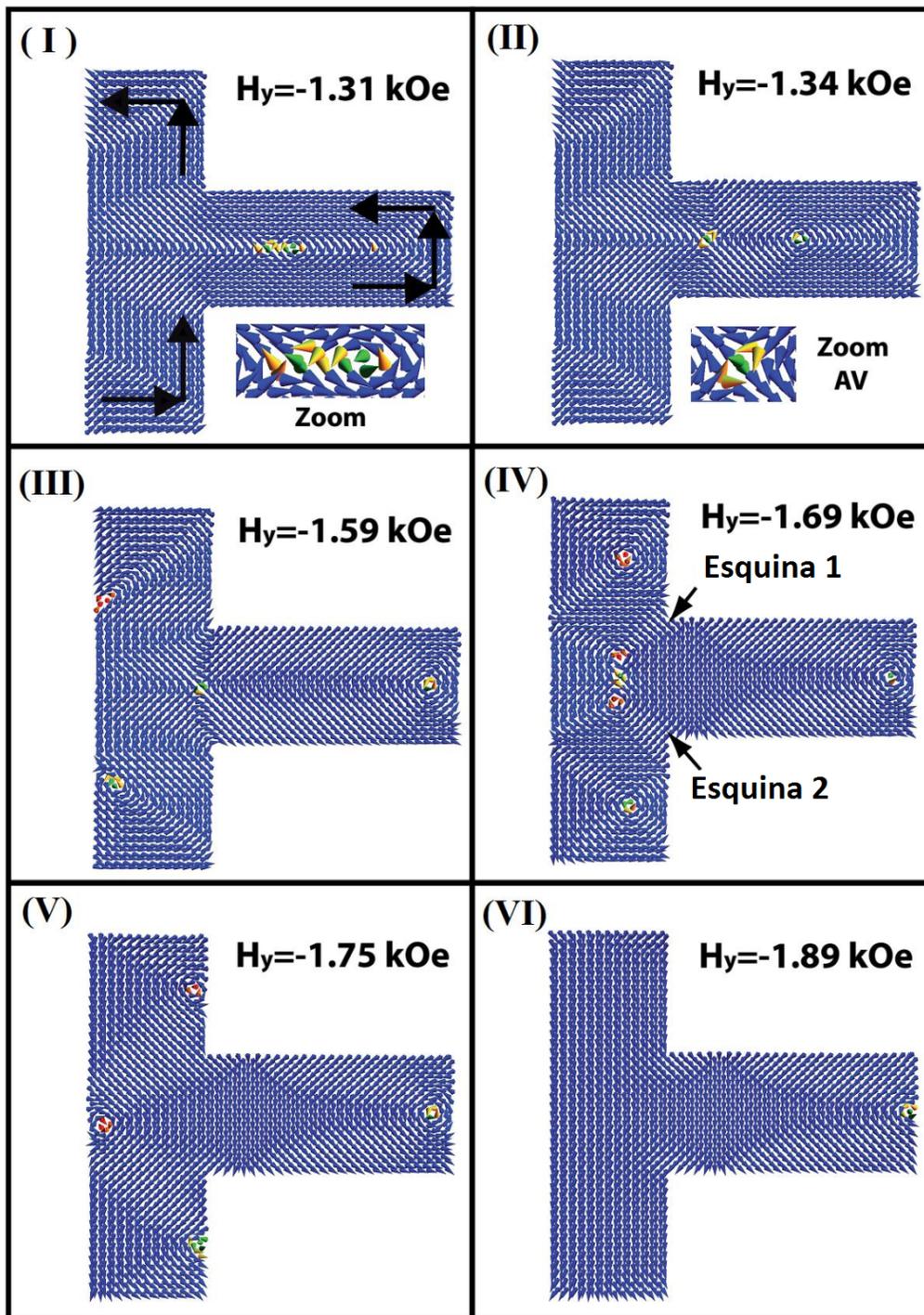
susceptibilidad da cuenta de una serie de máximos bien definidos. Sin embargo, sus posiciones y el ancho de estos máximos difieren de los mostrados para el caso anterior. Esto pone en manifiesto que el sistema, en ambos casos, sigue un proceso distinto a medida en que se revierte la magnetización. Con el fin de investigar el grado en que los dos procesos difieren, hemos analizado la distribución de los momentos magnéticos en la cercanía de los puntos correspondientes a los máximos de la susceptibilidad. Al igual que antes, es posible identificar seis puntos, los que han sido indicados en la curva de magnetización y enumerados desde (I) a (VI).



**Figura 4.3:** Curvas de magnetización y susceptibilidad alrededor del campo coercitivo para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $y$ . El recuadro inserto muestra el ciclo de histéresis completo. Los puntos sobre la curva de magnetización indican el paso del sistema a través de los estados en los que la susceptibilidad cambia rápidamente.

Tal como en el caso anterior, la reversión de la magnetización comienza con la formación de paredes de dominio, las que se encuentran completamente definidas cuando  $H$  alcanza el valor  $-1.31$  kOe (Fig. 4.4–I). Como es posible apreciar, dos de las paredes son de  $90^\circ$  y una de  $180^\circ$ . En este punto aparece un vórtice y un antivórtice juntos en la pared de dominio ubicada en la barra  $L_2$ . Ambas estructuras se propagan

en direcciones opuestas a lo largo de la pared, específicamente, el antivórtice se dirige hacia la intersección de ambas barras, tal como lo muestra la Fig. 4.4–II para un campo  $H = -1.34$  kOe. A un valor de campo  $H = -1.59$  kOe, dos vórtices nuclean con la misma quiralidad en el borde de la barra  $L_1$ , en la región en donde dos paredes de dominio tocan el borde (Fig. 4.4–III). A partir de ese punto el proceso de reversión continúa de la siguiente manera. Los dos vórtices recién creados se desplazan a lo largo de la pared, uno hacia la parte superior y el otro hacia la zona inferior de la barra  $L_1$ . Simultáneamente, se produce la nucleación de dos nuevos vórtices en las esquinas de la estructura, los que están indicados por flechas en la Fig. 4.4–IV. Los nuevos vórtices se mueven a lo largo de las paredes de dominio en dirección al antivórtice, el cual se encuentra ahora ubicado cerca del centro de la barra  $L_1$ . La situación se muestra con detalle en la Fig. 4.4–IV, a un campo  $H = -1.69$  kOe. Entonces, el antivórtice y uno de los nuevos vórtices se aniquilan, dejando sólo cuatro vórtices en el sistema, ubicados en los bordes de la partícula, tal como lo muestra la Fig. 4.4–V, para  $H = -1.75$  kOe. Tres de los cuatro vórtices están dentro de la barra  $L_1$  y dejan el sistema a un valor de campo  $H = -1.89$  kOe. El proceso de reversión se completa finalmente cuando el vórtice restante deja el sistema tras alcanzar el borde de la barra  $L_2$ .

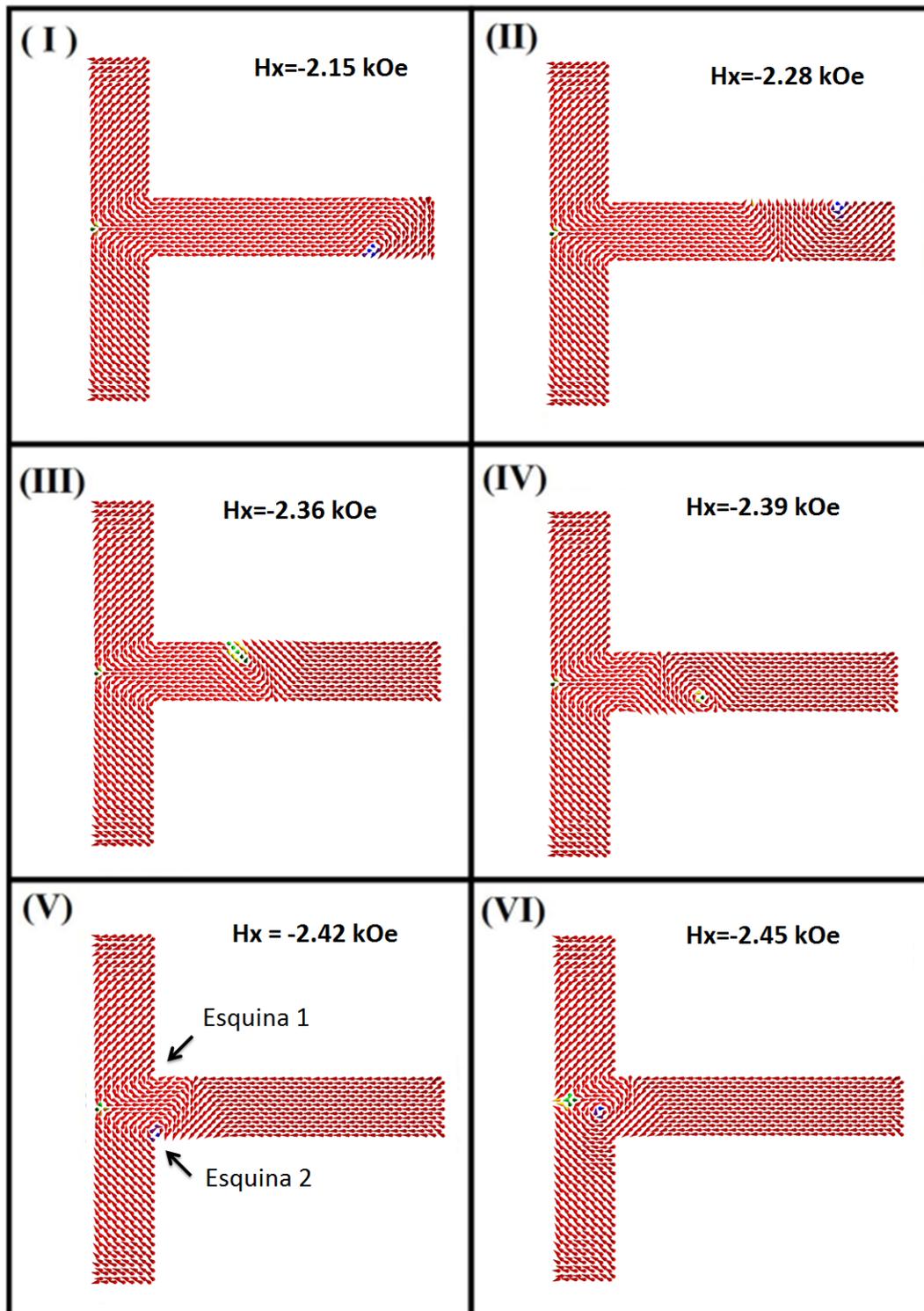


**Figura 4.4:** Configuración de los momentos magnéticos en los estados indicados por un punto sobre la curva de magnetización en la Fig. 4.3. Las flechas indican dos paredes de dominio de  $90^\circ$  y una de  $180^\circ$ .

---

Claramente, la falta de simetría del sistema con respecto al eje  $y$  deja de manifiesto un proceso mucho más complejo, en el cual es necesaria la aparición e interacción de un mayor número de estructuras a lo largo de la reversión de la magnetización.

Hemos considerado también el proceso de reversión en una configuración tipo T pero con un menor ancho de los segmentos rectangulares, específicamente con un ancho  $w = 40$  nm en lugar de  $w = 80$  nm. Los cálculos fueron realizados para las mismas orientaciones de campo magnético y los resultados obtenidos son cualitativamente muy cercanos a los detallados para la geometría con  $w = 80$  nm. A continuación, la Fig. 4.5 muestra el proceso de reversión tras aplicar un campo a lo largo del eje  $x$ .



**Figura 4.5:** Configuración de los momentos magnéticos en un sistema tipo T de ancho  $w = 40$  nm para un campo externo aplicado a lo largo del eje  $x$ .

El proceso de reversión en este sistema comienza también con la formación de paredes de dominio. La barra  $L_2$  presenta una pared de  $90^\circ$  acompañada por un vórtice que comienza a nuclear en la parte inferior. En la intersección de ambas barras se forman dos paredes de  $45^\circ$  y un antivórtice que se mantienen fijas durante gran parte del proceso, todo esto a un campo  $H = -2.15$  kOe (ver Fig. 4.5–I). Para  $H = -2.28$  kOe el vórtice de la barra  $L_2$  se desplaza y deja el sistema, generando nuevas paredes (ver Fig. 4.5–II). A partir de este punto el proceso de reversión continúa mediante la nucleación de otro vórtice en el borde superior de la barra  $L_2$ , a un campo  $H = -2.36$  kOe, el cual, al desplazarse verticalmente por la barra aumenta la sección en la cual la magnetización ha revertido, como muestra la Fig. 4.5–III. Hasta ahora las paredes de  $45^\circ$  permanecen fijas en la estructura. El segundo vórtice de la barra  $L_2$  abandona el sistema por la parte inferior de dicho segmento a  $H = -2.39$  kOe (ver Fig. 4.5–IV). Finalmente, es posible ver la nucleación de un último vórtice en la esquina 2 a  $H = -2.42$  kOe, el cual completa la reversión del sistema al aniquilarse con el antivórtice en la zona de intersección de ambas barras, tal como lo muestran las Fig. 4.5–V y 4.5–VI respectivamente.

En suma, mediante un estudio detallado del proceso de reversión de la magnetización en elementos tipo T ha sido posible seguir la evolución de los estados magnéticos a medida que varía el campo externo. El análisis de las curvas de histéresis y susceptibilidad han permitido asociar los cambios en el sistema a la nucleación y aniquilación de vórtices, antivórtices y paredes de dominio. Sin embargo, si bien los modos de reversión pueden ser complejos, su potencial para aplicaciones se basa en la reproducibilidad de los resultados ya que lo presentado en este capítulo fue observado utilizando 10 diferentes semillas para el cálculo de Monte Carlo.

En los resultados presentados se evidencia una fuerte relación entre simetría y complejidad del proceso de reversión, lo que debiera ser abordado en profundidad a la hora de buscar nuevas geometrías para grabación de información.

---

Los resultados de este trabajo han sido publicados en el artículo “Complex magnetic reversal modes in low-symmetry nanoparticles”, R. A. Escobar, N. M. Vargas, S. Castillo-Sepúlveda, S. Allende, D. Altbir and J. d Albuquerque e Castro, *Applied Physics Letters* 104, 123102 (2014).

# Control de la estabilidad magnética en multipelículas magnéticas para grabación tridimensional de información

---

## 5.1. Introducción

Como se ha descrito en esta tesis, la búsqueda de nuevas propuestas que permitan incrementar la densidad de información es un tema abierto y que ha sido abordado mediante diversas propuestas. En los capítulos previos de esta tesis se exploró la posibilidad de utilizar elementos con baja simetría, mostrando que son una alternativa válida para incrementar el número de bits que pueden ser grabados en una estructura. Una aproximación distinta está basada en explotar la anisotropía configuracional en partículas de variadas formas. Algunos ejemplos son los seis estados estables en remanencia identificados por Blachowicz *et al.* [13] en una partícula hexagonal formada con seis hilos de hierro unidos con mitades de esferas. Los mismos autores [12]

propusieron un sistema con cuatro estados distinguibles con el objetivo de duplicar la cantidad de información almacenable considerando estos cuatro estados como dos bits binarios. El sistema propuesto consiste en cuatro hilos de hierro en una configuración cuadrada y puede ser usado incluso sin cambiar la lógica digital usual. Otra opción ha sido propuesta por Thevenard *et al.* [60], considerando triángulos de permaloy. En este caso la anisotropía configuracional produce tres ejes equivalentes que podrían permitir la codificación de múltiples bits por elemento. Una característica común en estos sistemas es la alta simetría de su geometría, y la posibilidad de utilizarlos para almacenamiento de información de alta densidad requiere un control perfecto de la geometría, un problema que a la fecha aún se encuentra abierto.

Una aproximación alternativa explora el uso de discos o anillos magnéticos de multicapas en los cuales es posible encontrar más de dos estados magnéticos estables [17]. En esta dirección, Lavrijsen *et al.* [41] propuso un sistema de grabación tridimensional utilizando una estructura vertical formada por elementos ferromagnéticos magnetizados a lo largo de la dirección vertical. Mediante el control del espesor de cada elemento magnético y el acoplamiento de intercambio entre ellos, los autores formaron una válvula que permite la grabación de información en la forma de un solitón magnético.

En este trabajo hemos enfocado nuestra atención en un sistema de multicapas formado por películas magnéticas, cada una separada por un espaciador no magnético, permitiendo así la posibilidad de codificar múltiples bits por elemento. En este estudio, cada película magnética tiene anisotropía de forma a lo largo de la dirección de la mayor longitud del elemento (eje  $x$ ) con el propósito de que estas presenten un comportamiento biestable, el cual podría ser leído como 1 o 0. Si apilamos verticalmente (eje  $z$ ) las películas magnéticas es posible concebir un dispositivo de almacenamiento de información tridimensional, incrementando fuertemente la densidad de grabación en comparación a un disco duro bidimensional. Naturalmente,

es un reto encontrar el mecanismo de lectura y grabación que optimice el proceso, pero existen ya algunas propuestas [41] que podrían ser desarrolladas. Este tipo de sistemas de multicapas no es complejo de fabricar si se introduce una anisotropía de forma transversal a la dirección de crecimiento durante la fabricación de nanohilos multisegmentados mediante electrodeposición.

En la fabricación de un dispositivo de almacenamiento tridimensional es fundamental que los elementos magnéticos sean no interactuantes. Las interacciones presentes, según sea su intensidad, pueden destruir la estabilidad de la grabación magnética invirtiendo la magnetización de una película o debilitando su magnetización. Para evitar esto, la estructura tridimensional debe ser diseñada teniendo cuidado en elegir adecuadamente el espesor de las películas no magnéticas, que limitarán las interacciones pero que, de ser muy altas, harán inviable este sistema de almacenamiento tridimensional.

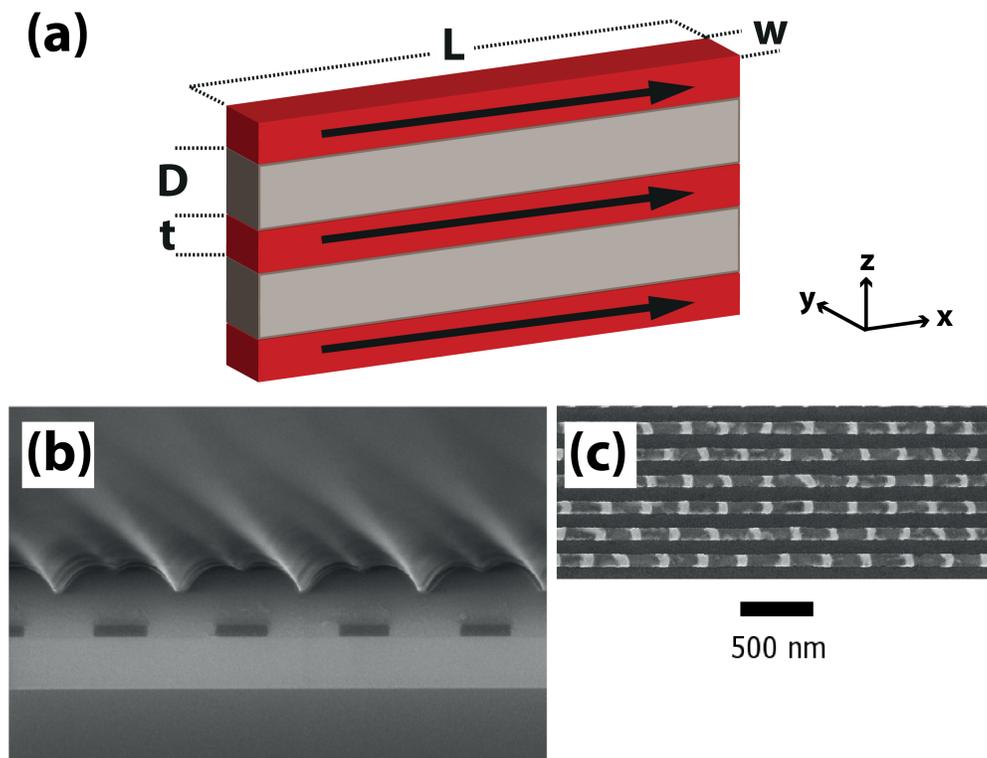
Con el propósito de investigar esta situación hemos realizado cálculos analíticos y numéricos, poniendo atención en el tamaño mínimo que puede tener la película de material no magnético para que dos películas magnéticas vecinas se comporten de manera independiente. Los resultados muestran que para espaciadores no magnéticos de 30 nm de espesor, las películas magnéticas se comportan de forma casi independiente, lo que permite que un arreglo tridimensional pueda ser empleado como un sistema de almacenamiento de alta densidad.

## 5.2. Modelo teórico

Nuestro punto de partida es un sistema de multicapas compuesto por  $N$  películas magnéticas de níquel separadas por un espaciador no magnético, como lo ilustra la Fig. 5.1. Estructuras similares, preparadas por Sergelius *et al.* [59] se muestran en la Fig. 5.1b,c. Para hacer uso de la anisotropía de forma le hemos asignado a cada

película un espesor  $t = 5$  nm, un ancho  $w = 20$  nm y un largo  $L = 100$  nm. El espaciador no magnético tiene el mismo ancho y largo que la placa magnética pero un espesor  $D$  diferente, el cual es variado buscando que las propiedades magnéticas del sistema de multicapas sean obtenidas a partir del comportamiento de una película magnética aislada.

Estructuras de este tipo pueden lograr una densidad de almacenamiento de  $20$   $Ngb/in^2$ , la cual es del orden de las densidades de grabación actualmente propuestas por las compañías de tecnología de información [6].



**Figura 5.1:** (a) Representación esquemática de un sistema de multicapas formado por películas magnéticas (rojo) separadas por un espaciador no magnético (gris). b) Nanocanales que permiten la síntesis de las películas magnéticas con sección rectangular. c) Vista superior de una muestra de películas magnéticas de Ni (blanco, de sección rectangular con dimensiones de  $70$  nm x  $80$  nm) separados por un espaciador de Cu (gris) preparados dentro de un nanocanal, de forma similar a b).

Si consideramos un espaciador metálico, el acoplamiento entre dos películas magnéticas tiene dos contribuciones; una es de carácter dipolar, y la otra es la interacción indirecta entre las capas magnéticas debido a la presencia del espaciador no magnético. Dado que la interacción indirecta decae rápidamente con el espesor del espaciador no magnético, es posible despreciarla para  $D$  suficientemente grande. A partir de los resultados obtenidos para las multicapas [14] que evidencian GMR es posible obtener una estimación del alcance de la interacción de intercambio indirecta. Esto nos lleva a pensar que más de 30 capas atómicas es una distancia  $D$  que no evidenciará interacción de tipo RKKY. Asumiendo que utilizaremos espaciadores mayores que esto, podemos enfocarnos sólo en las interacciones de origen dipolar entre las películas. Nuestra metodología no considera términos de anisotropía que puedan tener origen cristalino. Sin embargo estos pueden ser incluidos muy fácilmente en el modelo.

Una manera de obtener un valor adecuado para  $D$  es utilizar un modelo continuo. Es decir, asumir una distribución continua de momentos magnéticos en cada película y calcular las energías de intercambio, dipolar interna y dipolar entre las películas magnéticas. Sin embargo, aparecen algunas divergencias cuando tratamos de integrar el potencial, de tal manera que no es posible obtener una expresión analítica para la interacción dipolar entre dos películas no monoatómicas uniformemente magnetizadas. Debido a esta dificultad hemos considerado que cada película está formada por  $n$  monocapas apiladas una sobre la otra, y hemos seguido un procedimiento propuesto previamente por Altbir *et al.* [63]. Este comienza con una aproximación al continuo para monocapas atómicas que nos permite obtener la interacción dipolar entre dos planos atómicos de largo  $L$  y ancho  $w$  a una distancia de separación  $d$  con una magnetización por unidad de área  $\vec{m} = \sigma \hat{x}$  (ver Fig. 5.1) paralela a las películas y orientada a lo largo de la dimensión mayor  $L$ . La siguiente expresión da cuenta de la interacción dipolar entre dos monocapas uniformemente magnetizadas a una distancia de separación  $d$ .

$$\frac{E^{ml}(w, L, d)}{4\sigma_1\sigma_2} = G(d, w, L) + F(L, w, d) + \frac{L}{2} \ln \left( \frac{w^2 + d^2}{d^2} \right), \quad (5.1)$$

donde  $G(d, w, L) = d - \sqrt{w^2 + d^2} - \sqrt{L^2 + d^2}$  y  $F(A, B, C) = \sqrt{A^2 + B^2 + C^2}$ . Esta expresión permite obtener la energía dipolar,  $E^s(w, L, t)$ , o la anisotropía de forma, de una película formada por  $n = 2t/a_0$  monocapas simplemente sumando la expresión en la Ec. 5.1 sobre todos los pares de monocapas que forman la película, es decir

$$E^s(w, L, t) = \frac{1}{2} \sum_{[i,j]}^n E^{ml}(w, L, d_{ij}), \quad (5.2)$$

donde  $i, j$  denota las monocapas  $i$  y  $j$  dentro de la película, y  $d_{ij} = |i - j|a_0/2$  es la distancia entre las monocapas  $i$  y  $j$ , con  $i \neq j$ . En estas expresiones  $a_0$  es la constante de red y se considerará una red fcc por lo que la distancia entre planos vecinos es  $a_0/2$ .

Una vez tenemos la interacción dipolar entre las monocapas de cada películas es posible emplear un procedimiento similar para obtener la energía de interacción entre dos películas adyacentes  $a$  y  $b$  a una distancia de separación  $D$ ,  $E_{a,b}^{ts}(w, L, t, D)$ .

$$E_{a,b}^{ts}(w, L, t, D) = \frac{1}{2} \sum_{\{i,j\}}^{n(t)} E^{ml}(w, L, \tilde{d}_{ij}), \quad (5.3)$$

donde  $\tilde{d}_{ij}$  es la distancia entre las monocapas  $i$  y  $j$ , con  $i$  y  $j$  pertenecientes a distintas películas, es decir,  $\tilde{d}_{ij} \geq D$ , tal como se muestra en la Fig. 5.1.

Para ilustrar nuestro método más adelante mostramos resultados para una película magnética formada por átomos de níquel (Ni) con una magnetización por unidad de área uniforme dada por  $\sigma = 2\mu/a_0^2 = 0.095 \mu_B/\text{\AA}^2$  y cuya orientación es paralela al eje  $x$ .

### 5.3. Simulación numérica

Para verificar que las películas magnéticas individuales son independientes hemos realizado simulaciones de Monte Carlo del sistema de multicapas propuesto, considerando que los momentos magnéticos de la estructura ocupan las posiciones  $\{\vec{r}_i\}$  en una red fcc con una constante de red  $a_0 = 0.352$  nm. El valor del momento magnético para el níquel es  $\mu = 0.615 \mu_B$ , mientras que asumimos  $\mu = 0.0$  en el caso de átomos del espaciador no magnético. De esta forma la energía total del sistema de multicapas puede ser escrita como  $E_{tot} = E_{dip} + E_{ex} + E_H$ , donde  $E_{dip}$  es la energía dipolar total del sistema multipelículas, dada por

$$E_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{n}_{ij})] / r_{ij}^3, \quad (5.4)$$

$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ , y  $\hat{n}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) / r_{ij}$ . La interacción de intercambio está dada por  $E_{ex} = -\sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j$  con  $J_{ij} = J = 3.5$  meV para momentos magnéticos que son primeros vecinos y cero en otro caso.  $E_H = -\sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}$  es la energía de Zeeman asociada al campo magnético externo  $\vec{H}$ .

Si bien nuestro interés es realizar un cálculo discreto considerando todos los momentos magnéticos, cada película tiene del orden de  $10^7$  momentos magnéticos, haciendo prohibitivo este tipo de aproximación atómica por el tiempo de cálculo requerido. Para resolver esta limitación utilizamos el método de Monte Carlo combinado con la técnica de escalamiento previamente presentada. En este trabajo utilizamos el factor de escalamiento  $\chi = 0.008$ . Así el valor para la constante de intercambio  $J$  en el sistema escalado es igual a 0.028 meV.

El uso combinado de estas técnicas nos permitió obtener la histéresis de un sistema de multicapas mediante el siguiente procedimiento. Comenzamos con las películas magnéticas que forman el sistema completamente polarizadas por un campo externo  $\vec{H} = 3.0 \hat{x}$  kOe y una magnetización de saturación  $M_s$ . Para obtener la curva de

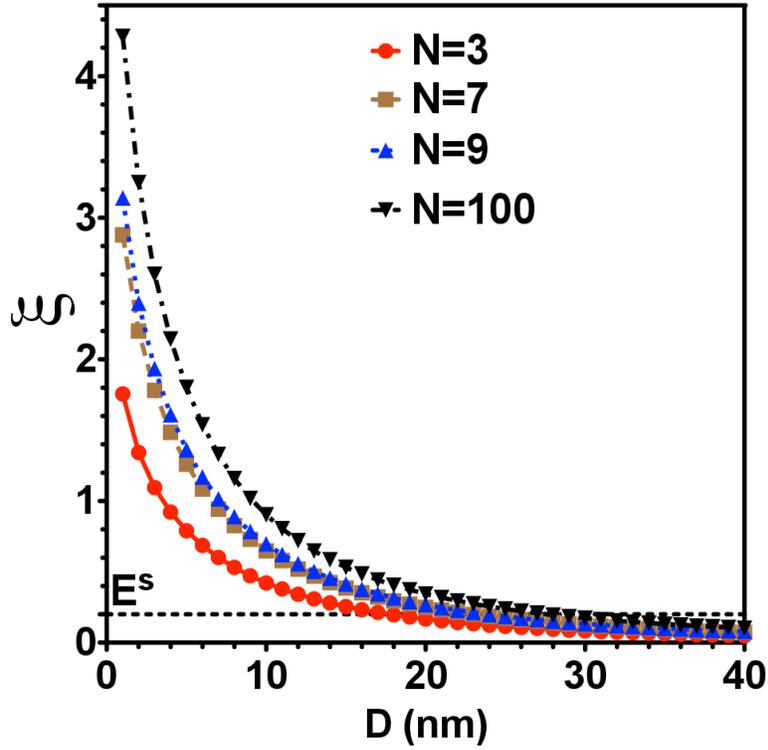
histéresis se varió la magnitud del campo en intervalos de  $\Delta H = 0.01$  kOe. De esta forma necesitamos 1203 pasos para completar la curva de histéresis. El valor de la magnetización normalizada,  $m = M_x/M_s$ , correspondiente a cada valor de  $H$  fue determinado después de 3500 pasos Monte Carlo (MCS) y para 10 semillas diferentes.

La estabilidad de los estados presentes en el sistema es también foco de este trabajo. Con esto en mente verificamos la estabilidad de dichos estados mediante el procedimiento que se detalla a continuación. Comenzamos con todas las películas del sistema completamente saturadas por un campo magnético externo de  $\vec{H} = 3.0 \hat{x}$  kOe. Posteriormente este campo es removido, permitiendo así que el sistema se relaje. Si existe una interacción dipolar apreciable entre las películas algunas de las películas invertirán su magnetización para minimizar la energía dipolar. Si las películas se comportan como independientes (es decir la interacción es despreciable) todas se mantendrán con su magnetización apuntando paralelas.

## 5.4. Resultados

Para encontrar el espesor mínimo del espaciador no magnético, esto es, la distancia  $D$  a la cual las multicapas no evidencian interacción, utilizamos el modelo analítico y calculamos la energía de interacción dipolar total del sistema, considerando que todas las películas magnéticas están completamente magnetizadas a lo largo de la dirección  $+\hat{x}$ . Para esto sólo es necesario sumar sobre todos los pares de películas en la expresión dada por la Ec. 5.3. Para obtener resultados comparables entre sí normalizamos la energía de interacción,  $E_{int}^N$ , de un sistema con  $N$  películas apiladas por la anisotropía de forma de  $N$  películas,  $NE^s$ . Es decir, definimos  $\xi(D, N) = E_{int}^N/(NE^s)$ , donde  $E_{int}^N = \sum_{a>b}^N E_{a,b}^{ts}(w, L, t, D)$ . La Fig. 5.2 muestra  $\xi$  como una función de la separación entre las películas magnéticas o espesor del espaciador,  $D$ , para un sistema de multicapas formado por 3, 7, 9 y 100 películas magnéticas. En esta figura es posible

observar que  $\xi$  decrece rápidamente a medida que se incrementa el valor de  $D$  para todo  $N$ , y también que  $\xi$  se incrementa con  $N$ .

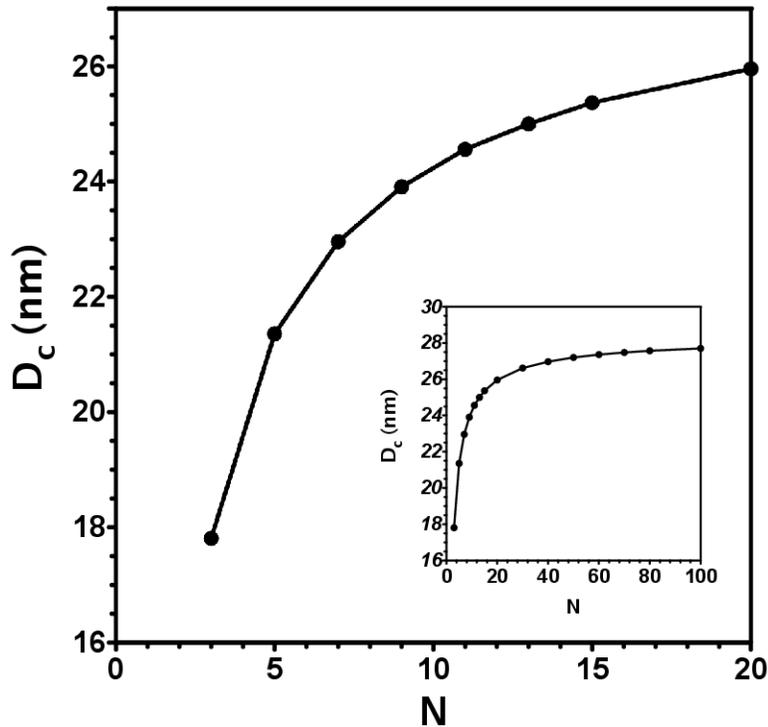


**Figura 5.2:**  $\xi = E_N^{int}/(NE^s)$  como función de  $D$  multicapas formadas por  $N$  películas magnéticas con dimensiones  $L = 100$  nm,  $w = 20$  nm y  $t = 5$  nm.

La Fig. 5.3 ilustra la distancia  $D_c$  a la cual  $\xi \leq 0.2$  para diferente número de películas. Para  $N > 80$ ,  $D$  alcanza un valor límite cercano a 30 nm. Es decir, sin importar el número  $N$  de películas separadas a una distancia superior a 30 nm, la energía de interacción es menor a un 20% de la anisotropía de forma del sistema completo. A pesar de que este número pudiera parecer arbitrario, la idea de fondo es que representa una distancia que podría ser explorada mediante otros cálculos, en la búsqueda de que las películas se comporten en forma independiente.

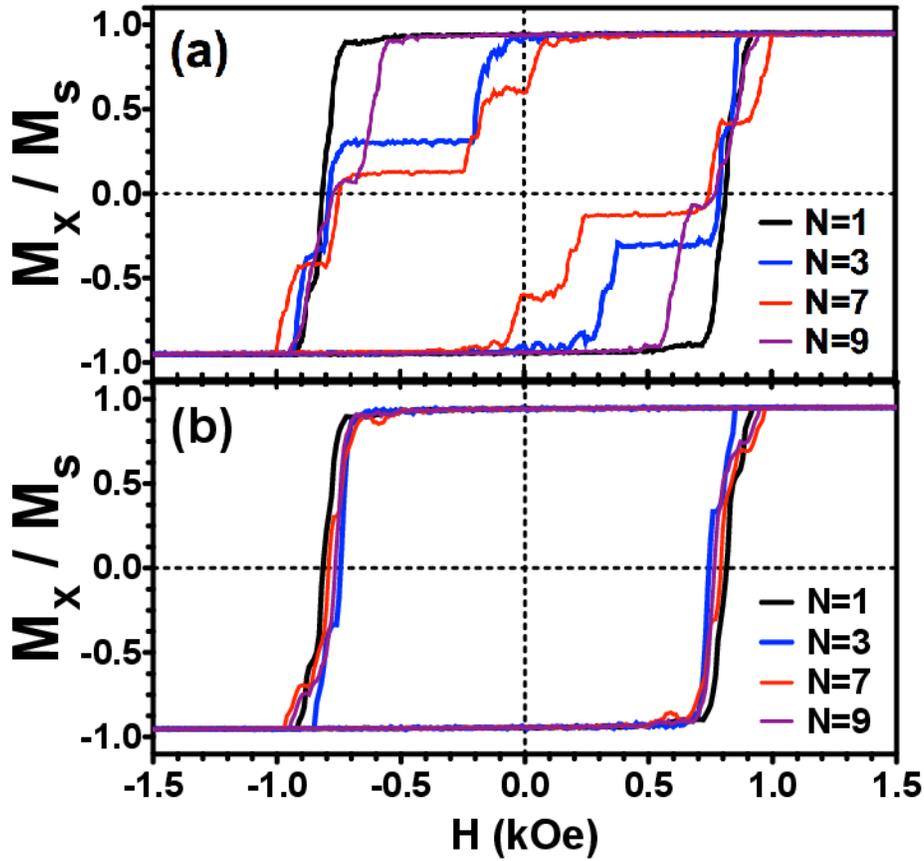
Para verificar lo anterior realizamos simulaciones de Monte Carlo del proceso de reversión de un sistema de multicapas con espaciadores de  $D = 5$  y 30 nm, y las

comparamos con el ciclo de histéresis de una película aislada.



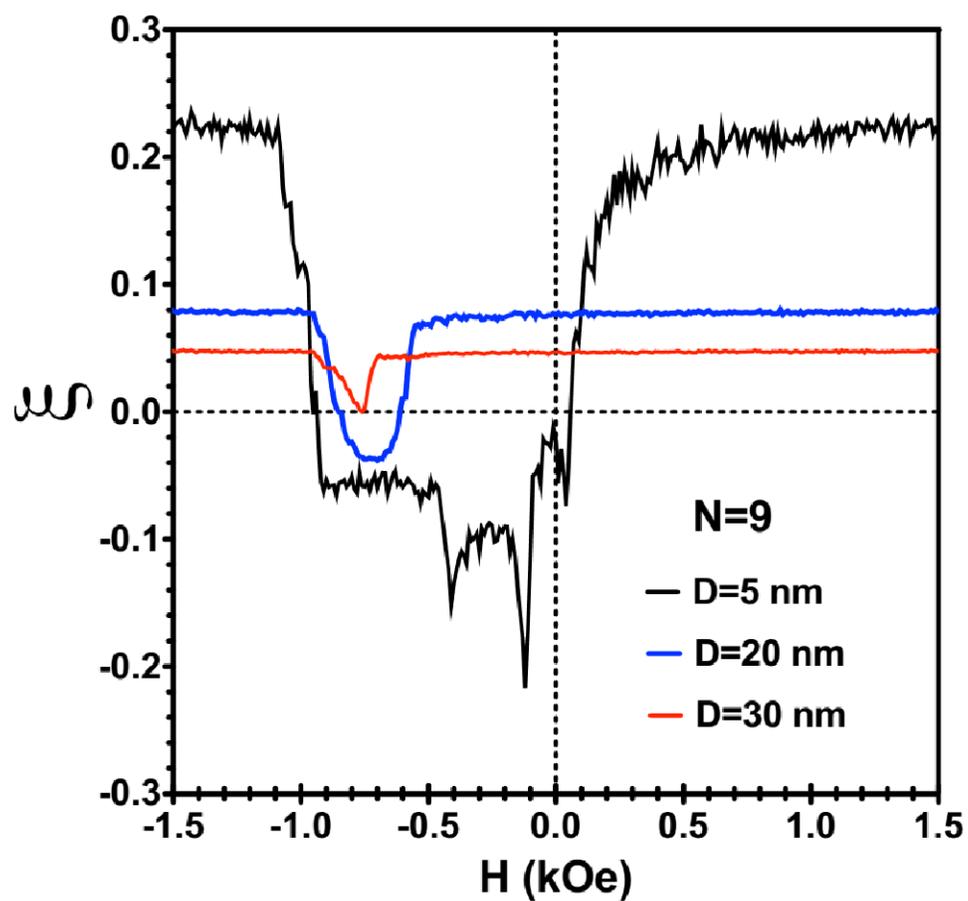
**Figura 5.3:** Distancia crítica,  $D_c$ , a la cual  $\xi = 0.2$  en la Fig. 5.2 para diferente número de películas,  $N$ , en el sistema de multicapas.

Las curvas de histéresis resultantes se presentan en la Fig. 5.4 para multicapas con  $N = 1, 3, 7$ , y  $9$  películas magnéticas. Como se esperaba, cuando las películas están separadas por  $D = 5$  nm, observamos que el proceso de reversión es muy diferente al proceso de reversión de una película aislada, confirmando que a esta distancia las películas magnéticas son fuertemente interactuantes. Sin embargo, cuando las películas se encuentran a  $D = 30$  nm, el ciclo de histéresis de la multicapa, independiente del número de películas magnéticas de esta, es muy similar al de una película aislada, sugiriendo que a esta distancia la interacción entre las películas puede despreciarse.

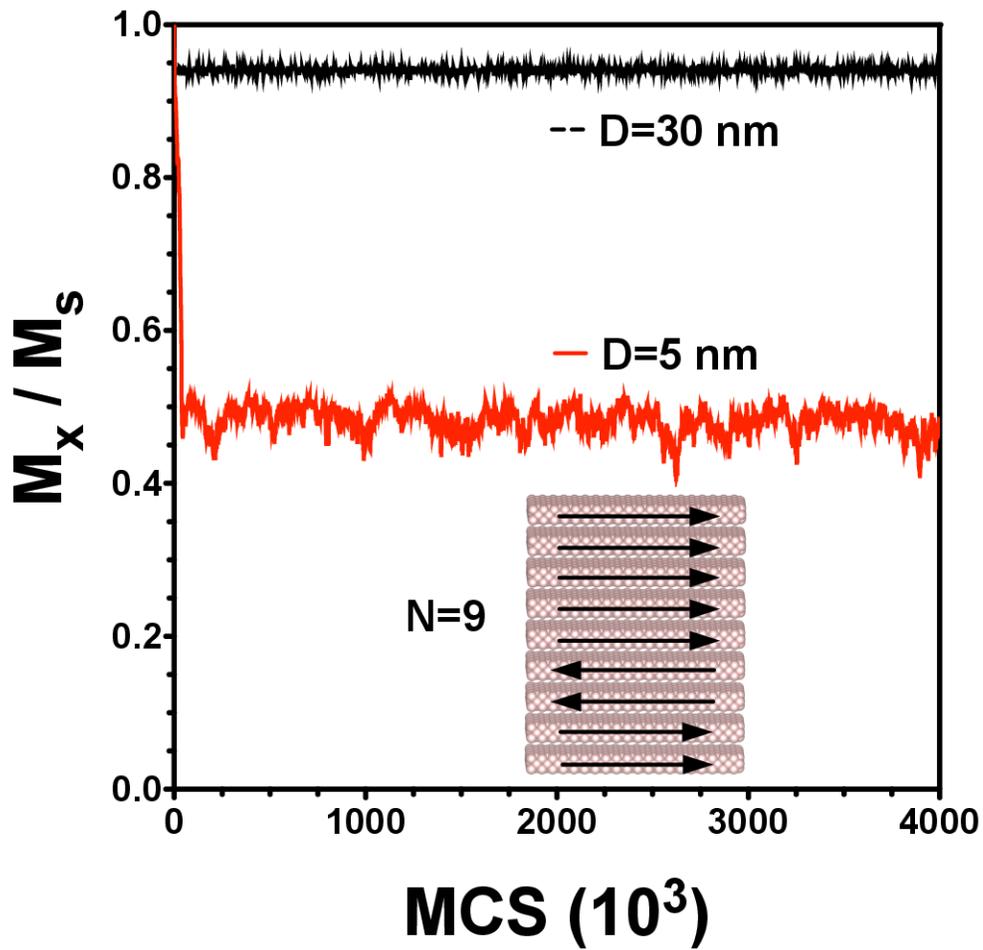


**Figura 5.4:** Ciclo de histéresis para multicapas de  $N = 1, 5, 7$  y  $9$  películas magnéticas separadas por  $D = 5$  nm (a) y  $D = 30$  nm (b).

Para obtener más información respecto del proceso de reversión de la multicapa graficamos la energía de interacción normalizada,  $\xi$ , sólo para una rama del ciclo de histéresis de un sistema formado por  $N = 9$  películas separadas por  $D = 5$  y  $30$  nm. Los resultados, descritos en la Fig. 5.5, confirman nuevamente que para  $D = 30$  nm durante todo el proceso de histéresis la energía de interacción dipolar es muy pequeña en comparación a la anisotropía de forma de la multicapa completa, particularmente del orden del 5% de la anisotropía de forma del sistema.



**Figura 5.5:** Energía de interacción normalizada durante un ciclo de histéresis para un sistema de multicapas formado por  $N = 9$  películas magnéticas.



**Figura 5.6:** Magnetización normalizada de una multicapa de  $N=9$  películas magnéticas durante la relajación ( $H = 0$ ) como función del número de pasos de Monte Carlo, MCS. Cuando MCS=0, la multicapa está completamente saturada a lo largo de la dirección  $x$ . La ilustración esquemática de las películas magnéticas inserta en la figura describe un sistema para  $D = 5$  nm en el cual algunas de las películas invierten su magnetización debido a la interacción entre ellas.

Finalmente examinamos la estabilidad en el tiempo de un sistema de multicapas. Para esto saturamos completamente la multicapa a lo largo de la dirección  $x$ . Posteriormente se remueve el campo y se deja relajar al sistema durante  $4 \times 10^6$  pasos de Monte Carlo (MCS). Si la interacción dipolar entre las películas es intensa,

es esperable que algunas películas inviertan su magnetización. La Fig. 5.6 muestra el resultado obtenido para la magnetización de la multicapa en unidades arbitrarias en función del número de pasos Monte Carlo. Esto deja en evidencia que un sistema formado por 9 películas es magnéticamente estable a una distancia  $D = 30$  nm. Sin embargo, cuando  $D = 5$  nm la magnetización disminuye, indicando que la orientación de la magnetización de algunas películas se ha invertido.

De esta forma podemos concluir que el modelo analítico nos permite obtener un espesor del espaciador que asegura que las películas se comportarán como independientes. Esto, confirmado por las diversas simulaciones numéricas, es fundamental a la hora de proponer el uso de multicapas para la grabación de información de alta densidad.

- Los resultados mostrados en este capítulo han dado origen a un manuscrito enviado a *Applied Physics Letters* con el nombre “Control of the magnetic stability in stacks of magnetic slabs for three-dimensional recording”, R. A. Escobar, S. Castillo-Sepúlveda, S. Allende, D. Altbir, Philip Sergelius, D. Görlitz, and K. Nielsch. *L15 – 04980*, con fecha 15 de Junio de 2015.

# Multicapas de $[\text{Co}/\text{Ni}]_n/\text{NiFe}$ : Una propuesta para controlar la dirección de la anisotropía

---

## 6.1. Introducción

En los últimos cinco años se han realizado diversos estudios buscando la forma de controlar la anisotropía de un sistema. Una propuesta se basa en el uso de aleaciones de cobalto y níquel en las cuales se varía los porcentajes de cada elemento buscando manifestar más (o menos) la anisotropía axial del cobalto [67]. Otra alternativa explorada es el uso de una multicapa con alta anisotropía uniaxial acoplada con películas magnéticas sin anisotropía cristalina [30]. Estos últimos sistemas presentan un gran potencial para ser empleados en medios de grabación magnética perpendicular (PMR) y dispositivos espintrónicos tales como osciladores de transferencia de espín a la nanoescala [55, 34]. Estas multicapas complejas permiten un control preciso del comportamiento magnético eligiendo los materiales que la forman y el espesor de cada uno de ellos.

Si crecemos juntas películas magnéticas con diferente anisotropía, el acoplamiento de intercambio entre las películas permite generar una anisotropía efectiva cuya orientación dependerá de las composición precisa de la películas. Este proceso ha sido utilizado previamente para obtener propiedades magnéticas específicas [25]. Uno de los sistemas estudiados son las películas formadas por capas magnéticas blandas y duras preparadas a partir de películas de  $\text{Co}_{0,66}\text{Cr}_{0,22}\text{Pt}_{0,12}/\text{Ni}$  con eje fácil fuera del plano y en el plano, respectivamente [49]. Estas películas muestran cambios en la dirección de la anisotropía efectiva en función del espesor de Ni con que hayan sido preparadas. También las propiedades magnéticas de multicapas de Co/Pd con anisotropía magnética perpendicular cubiertas con películas delgadas de permalloy han sido investigadas [61]. Los autores variaron el espesor de la película de permalloy en una estructura de  $[\text{Co}/\text{Pd}]_5/\text{NiFe}(t)$ , encontrando que la anisotropía neta de la muestra cambia de signo, generando dominios con magnetización fuera del plano, incluso para películas gruesas de NiFe. Por otro lado, Held *et al.* [31] estudiaron el mismo sistema el año 2014.

Diferentes estructuras del tipo  $[\text{Co}/\text{Ni}]_4/\text{Co-NiFe}$  han sido recientemente estudiadas por Chung *et al.* [19] observando que la fuerte anisotropía magnética perpendicular de la multicapa de Co/Ni compite con la anisotropía de forma en el plano de la película de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  (Py), permitiendo configuraciones magnéticas únicas. Además los autores observaron que la variación del espesor de la película de NiFe se traduce en un cambio en el ángulo que muestra la magnetización neta del sistema.

Si bien existen varias simulaciones micromagnéticas que muestran concordancia con los datos experimentales, existe escasa información respecto de los modos de reversión asociados a diferentes anisotropías magnéticas efectivas. Con el fin de esclarecer este último punto hemos realizado simulaciones de Monte Carlo de diversas multicapas debido a que esta técnica ofrece una aproximación complementaria incorporando efectos térmicos, los que son comúnmente de consideración paramétrica

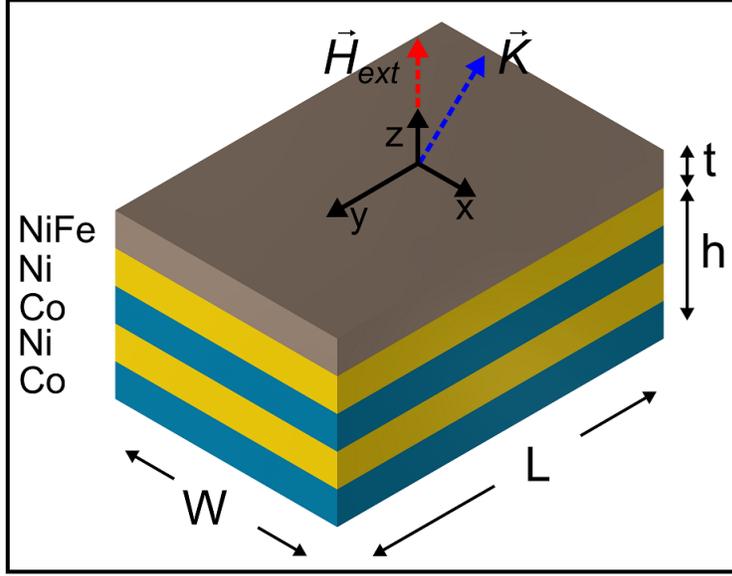
---

en simulaciones micromagnéticas. La adecuación de esta técnica al estudio de los modos de reversión ha sido confirmada a través del estudio de diversos sistemas y geometrías, obteniendo un buen acuerdo con resultados experimentales [43].

En este capítulo examinamos la anisotropía magnética y el comportamiento asociado durante la reversión de una película delgada rectangular de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}$ . Hemos abordado multicapas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]$  debido a que su anisotropía perpendicular hace posible evidenciar pequeños cambios en las propiedades magnéticas del sistema completo, incluso al considerar películas de NiFe gruesas.

Medante simulaciones de Monte Carlo hemos concluido que la anisotropía efectiva es determinada por la competencia existente entre la anisotropía en el plano de la película de NiFe y la anisotropía perpendicular de las multicapa de  $[\text{Co}/\text{Ni}]$ , de tal forma que es posible controlar el ángulo de la magnetización en remanencia con respecto al plano normal a la muestra tan sólo variando el espesor de la película de NiFe. Este cambio en la dirección del eje fácil tiene una gran influencia en los modos de reversión del sistema completo. Los resultados obtenidos fueron comparados con resultados experimentales de sistemas magnéticos similares.

## 6.2. Modelo teórico



**Figura 6.1:** Diagrama del sistema de multicapas estudiado mediante simulaciones de Monte Carlo.

Nuestro sistema está formado por una película delgada de NiFe depositada sobre multicapas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2$ , tal como muestra la Fig. 6.1. La película tiene una forma rectangular de largo  $L = 300$  nm y ancho  $w = 100$  nm. Cada película de Co o Ni tiene un espesor de 2.5 nm. En una muestra de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2$ , el espesor total es de  $h = 10$  nm. El espesor de la película de NiFe fue variando entre  $t = 0$  y 20 nm, de forma que el espesor total de la muestra está dado por  $h_1 = h + t$ . Para simular las propiedades magnéticas hemos considerado que todos los momentos magnéticos,  $\{\vec{\mu}_i\}$ , ocupan posiciones dadas por  $\{\vec{R}_i\}$  en una red fcc con constante de red  $a_0 = 3.6$  Å. Si consideramos contribuciones de la interacción de intercambio, dipolar y anisotropía a la energía del sistema, esta puede ser escrita como

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (E_{ij} - J_{ij} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j) + E_H + E_K, \quad (6.1)$$

donde  $E_{ij}$  es la energía dipolar dada por

$$E_{ij} = [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{n}_{ij})] / r_{ij}^3, \quad (6.2)$$

con  $r_{ij} = |\vec{R}_i - \vec{R}_j|$ , and  $\hat{n}_{ij} = (\vec{R}_i - \vec{R}_j) / r_{ij}$ . La constante de intercambio  $J_{ij}$  es igual a  $J$  para momentos magnéticos que son primeros vecinos y cero en otro caso.  $E_H = -\sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}$  es la energía de Zeeman asociada a un campo magnético aplicado  $\vec{H}$ , y la anisotropía está dada por  $E_K = -\sum_i \vec{\mu}_i^2 \cdot \vec{K}$ .

Hemos empleado el método de Monte Carlo combinado con la técnica de escalamiento mencionado en capítulos anteriores [64, 23] para obtener el comportamiento de nuestros sistemas. En este caso particular el valor de la constante de escalamiento utilizada es  $\chi = 0.001$ , con lo que nuestro sistema de  $[\text{Co/Ni}]_2$  simulado tiene 6864 átomos. Destacamos que la forma de las curvas de magnetización obtenidas es insensible al valor preciso de la constante de escalamiento.

Las simulaciones de Monte Carlo fueron realizadas empleando el algoritmo Metropolis [11]. Los parámetros magnéticos, listados en la Tabla 6.1, han sido previamente usados en otras simulaciones [64, 45].

**Tabla 6.1:** Valores para los parámetros magnéticos empleados

Material	$\mu(\mu_B)$	$J'$ (meV)
Co	1.72	0.039
Ni	0.62	0.045
NiFe	1.60	0.038

Para obtener la curva de histéresis del sistema hemos aplicado un campo externo perpendicular (**OP**), y paralelo, (**IP**), al plano de la muestra. En el caso del campo aplicado en el plano, la dirección coincide con el eje  $y$  de la muestra, tal como lo muestra la Fig. 6.1. En ambos casos, la configuración inicial muestra a la mayoría de

los momentos magnéticos apuntando a lo largo de la dirección de un campo aplicado de 6 kOe. Para obtener la curva de histéresis se consideraron variaciones de  $\Delta H = 0.01$  kOe en el campo externo. En base a esto se necesitaron 2403 valores de campo para completar un ciclo.

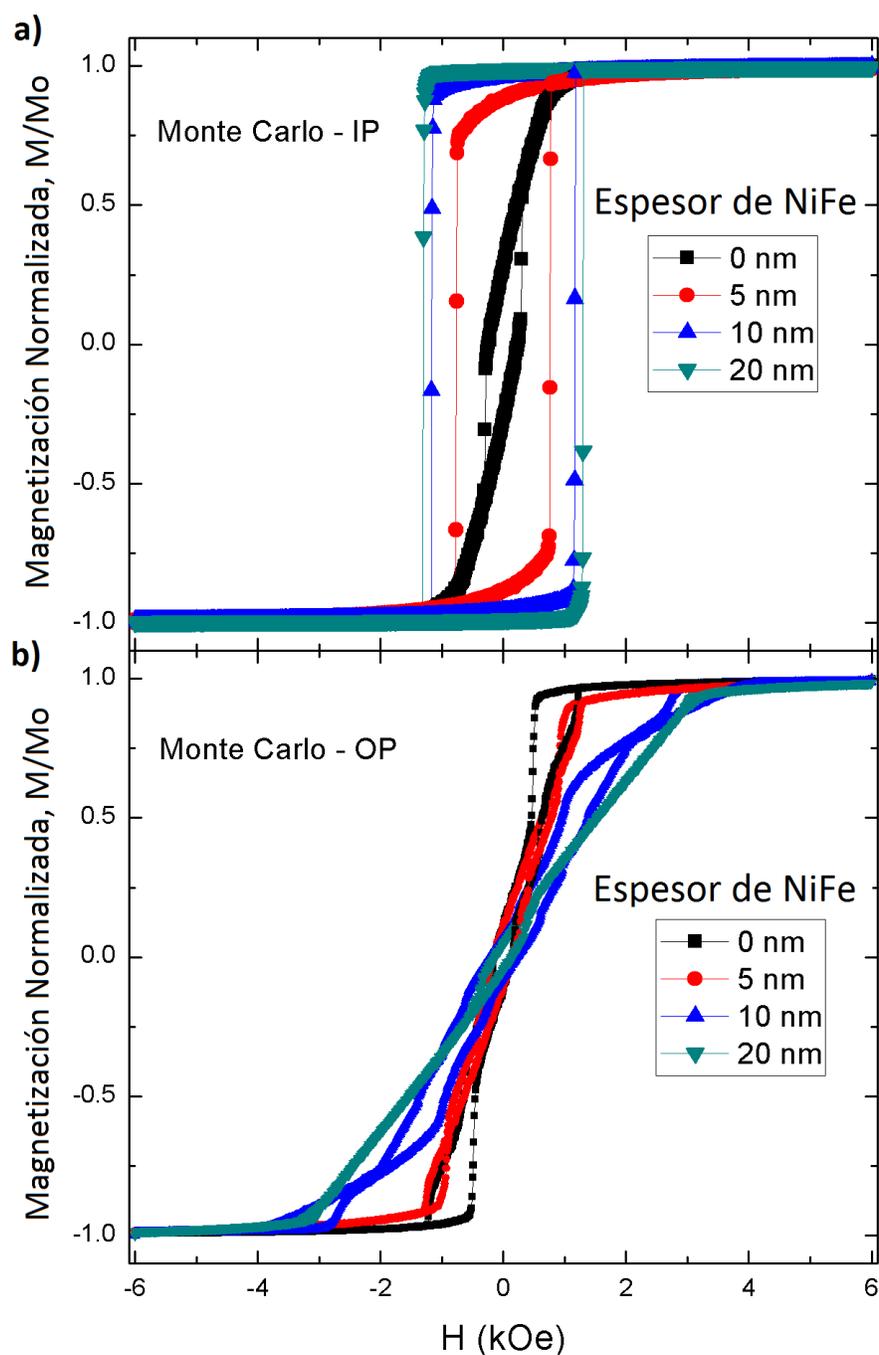
La anisotropía magnética perpendicular (PMA) presente en las multipelículas de [Co/Ni] [57, 68] mostrada en la Fig. 6.1 para  $t = 0$  nm fue introducida en las simulaciones Monte Carlo mediante la incorporación de una anisotropía cuyo valor corresponde al 1 % del valor de  $J_{Co-Ni} = \sqrt{J_{Co} \cdot J_{Ni}} = 11.76$  meV [50]. De esta forma encontramos que  $K_{Co-Ni} = 0.12$  meV. La constante de intercambio para modelar la interfase de Ni/NiFe fue calculada a partir de la expresión  $J_{Ni-NiFe} = \sqrt{J_{Ni} \cdot J_{NiFe}} = 11.74$  meV. En la película de NiFe no se consideró ningún otro término de anisotropía además de su anisotropía de forma. De esta forma, en la multicapa [Co/Ni]/NiFe coexisten dos anisotropías uniaxiales con direcciones ortogonales; la anisotropía fuera del plano  $\vec{K}_o$  debido a la película de [Co/Ni] y la anisotropía de forma debida a la forma rectangular del sistema,  $\vec{K}_s$ . Esto da como resultado una anisotropía uniaxial efectiva,  $\vec{K}_{ef}$ , que apuntará en una dirección a determinar.

### 6.3. Resultados.

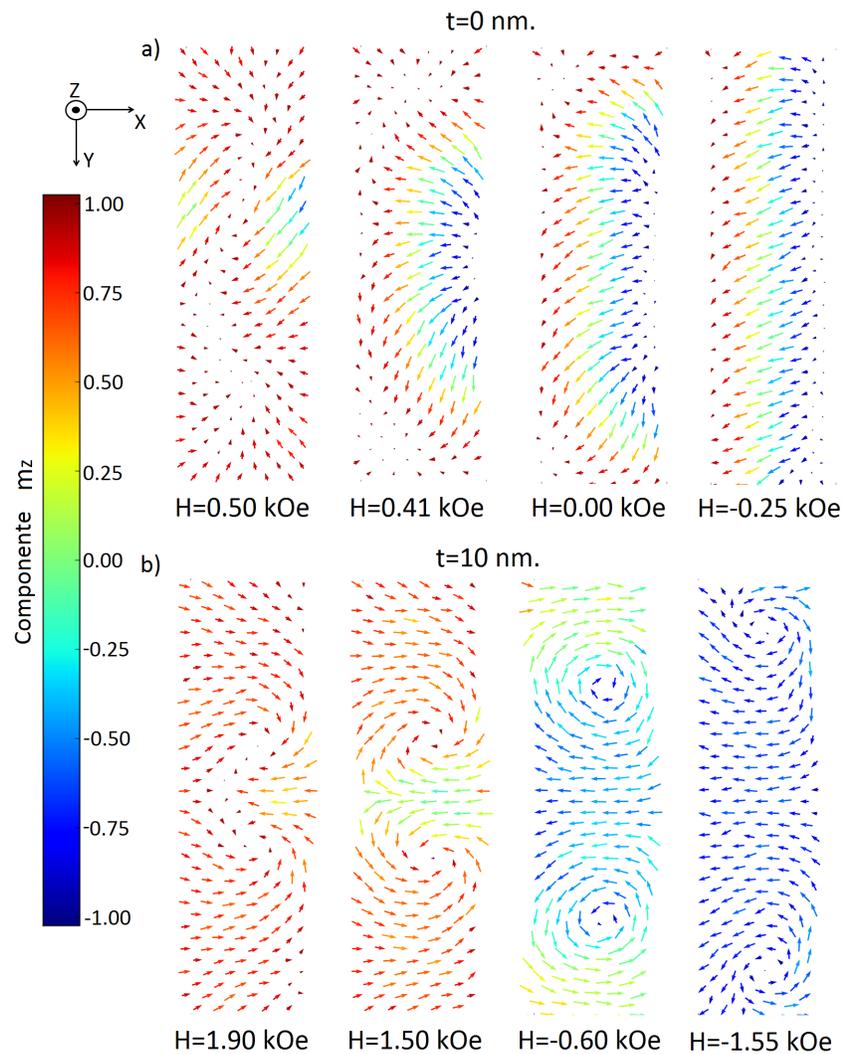
La Fig. 6.2 muestra varios ciclos de histéresis obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo para diferentes espesores de la película de NiFe y para un campo externo aplicado tanto paralelo (a) como perpendicular (b) al plano de la muestra. En estos resultados observamos que la remanencia en el plano (IP) y la coercividad  $H_c$  se incrementa con el espesor de la películas de NiFe,  $t$ . Para  $t = 0$  nm la coercividad es de 0.24 kOe mientras que para  $t = 20$  nm es de 1.30 kOe. Cuando aplicamos un campo en el plano de la muestra (IP) es más fácil saturar las muestras más gruesas. Por el contrario, cuando el campo es aplicado fuera del plano (OP), se necesitan

---

campos mayores para saturar muestras gruesas. Estos resultados dan cuenta de una reorientación del eje fácil de magnetización desde OP hacia IP a medida en que aumenta el espesor de la película de permaloy.



**Figura 6.2:** Ciclos de histéresis de una nanoestructura de  $[\text{Co/Ni}]_2/\text{NiFe}(t)$  obtenidas mediante simulaciones de Monte Carlo tras aplicar un campo magnético (a) paralelo y (b) perpendicular al plano, con  $t$  variando desde 0 a 20 nm.



**Figura 6.3:** Representación esquemática de la configuración de espines durante el proceso de reversión tras aplicar un campo perpendicular, para espesores de NiFe de (a)  $t = 0$  nm (similar a  $t = 5$  nm) y (b)  $t = 10$  nm (similar a  $t = 20$  nm).

La Fig. 6.3 muestra la configuración de espines de la superficie de la muestra para diferentes espesores de NiFe. Estas imágenes son tomadas a valores específicos del campo OP durante la reversión. El estado inicial del sistema es la saturación a lo largo del eje  $z$  y la escala de color representa la variación de  $m_z$  entre  $-1.0$  y  $1.0$ . A pesar de que estas imágenes representan la estructura magnética de la monocapa

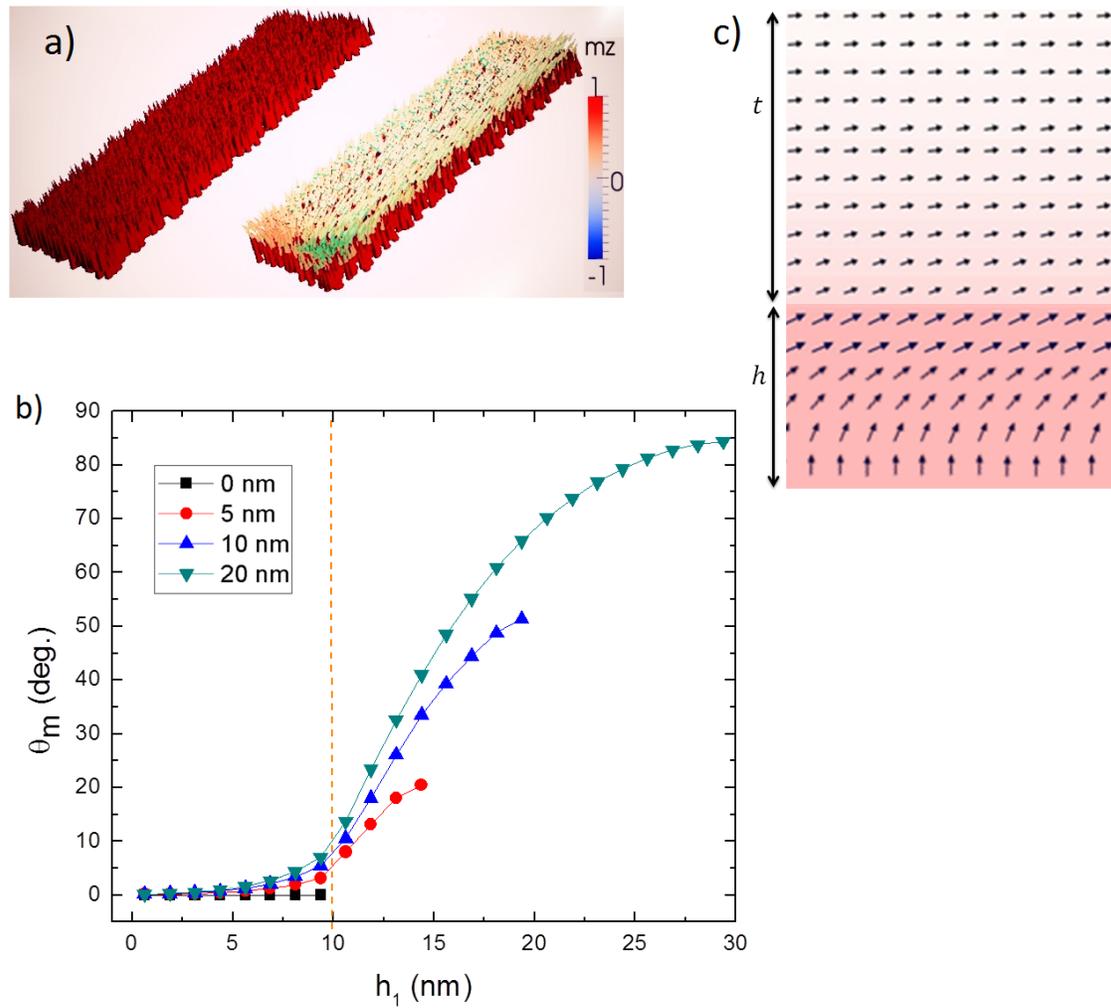
superficial, hemos analizado la configuración de espines del resto de las monocapas y observamos un comportamiento muy similar.

Cuando  $t = 0$  nm la reversión en el sistema comienza con la formación de dominios de reversión en los bordes más largos de la muestra, delineados por paredes de Néel con un ancho de 30 nm aproximadamente. Luego, al disminuir el campo, un dominio se expande y se propaga a través del ancho de la muestra, completando así la reversión de la magnetización. Este proceso es prácticamente el mismo cuando el espesor de la película de NiFe es  $t = 5$  nm. Sin embargo, cuando  $t = 10$  nm, para campos cercanos a 2 kOe, la muestra presenta una gran componente de la magnetización en el plano y el proceso de reversión resulta conducido por la formación de un par de vórtices en las cercanías de la zona central de la muestra. Los vórtices se propagan hasta los límites de la muestra, revirtiendo la magnetización. El comportamiento es similar para  $t = 20$  nm.

Con el propósito de comprender el impacto de la anisotropía en la dirección de la magnetización hemos considerado analizar la relajación de la muestra para diferentes espesores  $t$ . El procedimiento para estudiar el sistema durante la relajación es el siguiente. Comenzamos con la estructura completamente saturada a lo largo de la dirección  $z$ . A continuación dejamos que el sistema se relaje sin campo durante  $10^9$  pasos de Monte Carlo. La Fig. 6.4 evidencia la variación de la dirección de la magnetización a través del espesor de la película. La imagen (a) ilustra una vista superior de la magnetización de una muestra con espesor  $t = 20$  nm saturada a lo largo del eje  $z$  y la vista superior de la magnetización de la muestra relajada. La imagen b) corresponde al ángulo  $\theta$  en cada monocapa para las cuatro muestras consideradas en el estudio. El diagrama de la vista lateral de la muestra se detalla en la imagen (c). Esta figura detalla cómo los momentos magnéticos de la película de NiFe están orientados a lo largo de la dirección de mayor longitud en el plano, debido a la anisotropía de forma. Sin embargo, a pesar de esta fuerte influencia de la anisotropía

---

de forma, los momentos magnéticos de Co/Ni están sometidos a una anisotropía fuera del plano, orientando así su magnetización en un ángulo particular. Esta variación angular en la magnetización puede ser ilustrada por el ángulo  $\theta_i$  (Fig. 6.4b), el cual da cuenta de la dirección de la magnetización de cada momento con respecto al eje  $z$ .  $\theta_i = 0^\circ$  representa una magnetización completamente OP, y  $\theta_i = 90^\circ$  denota una magnetización que se encuentra completamente IP. Es importante distinguir esta situación para comprender lo que sucede durante el ciclo de histéresis, tal como se ha explicado anteriormente. Durante el ciclo de histéresis todas las monocapas de la muestra siguen el campo y entonces exhiben un comportamiento homogéneo, siendo sus orientaciones de la magnetización muy similares. Durante el proceso de relajación, la anisotropía juega un rol fundamental en la orientación de los espines en cada monocapa debido a la ausencia de campo externo, siendo entonces su rol mucho más relevante.

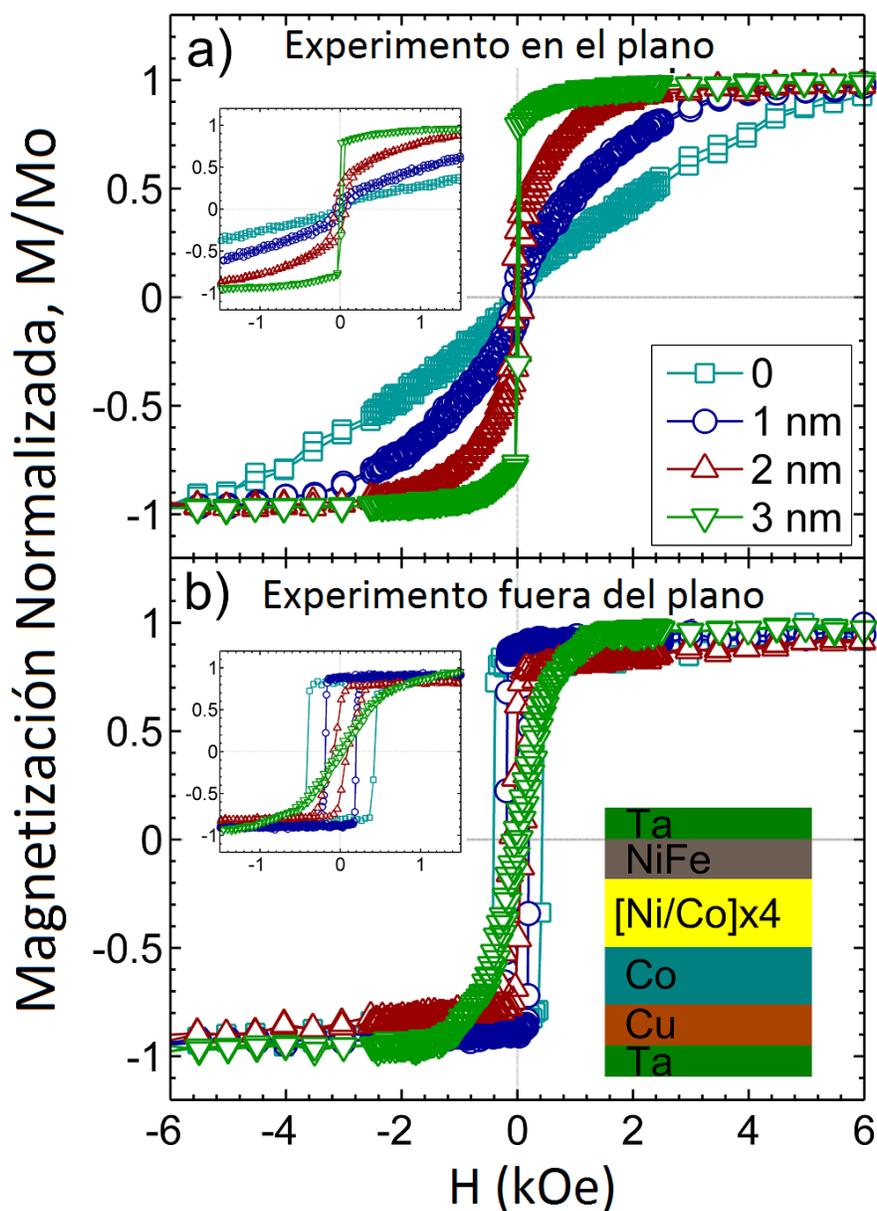


**Figura 6.4:** (a) Imágenes de la componente  $z$  de la magnetización de multicapas de Co/Ni antes y después del proceso de relajación para una muestra con  $t = 20$  nm. b) Ángulo  $\theta$  en cada monocapa para las cuatro muestras consideradas en el estudio. La línea punteada representa la interfase entre las películas de Co/Ni y NiFe. (c) Configuración de los momentos magnéticos en el plano  $YZ$  para  $t = 20$  nm. La escala de colores representa el cambio gradual en el ángulo.

Los resultados obtenidos para las muestra con  $t = 0, 5, 10$  y  $20$  nm mostrados en la Fig. 6.4b nos permiten concluir que la interfase de Co/Ni exhibe una cierta magnetización IP como resultado del acoplamiento de intercambio con la película de

NiFe, pero las capas inferiores o más profundas de la estructura de Co/Ni permanecen magnetizadas en la dirección OP debido a la anisotropía de forma. En la Fig. 6.4b la línea punteada denota la interfase NiFe-Co/Ni. Claramente hay un cambio gradual en la orientación de la magnetización a través de la estructura, tal que todos los momentos magnéticos de Co/Ni muestran un ángulo entre  $0^\circ$  y  $10^\circ$  respecto al eje  $\hat{z}$ . También es posible evidenciar este cambio gradual en la magnetización de la película de NiFe hasta que todos los momentos magnéticos quedan IP. Sin embargo, incluso la película más gruesa de NiFe no está completamente saturada IP, debido a la gran influencia de la anisotropía perpendicular.

A objeto de comparar los resultados obtenidos con el comportamiento de un sistema preparado experimentalmente, se realizaron mediciones sobre películas de Ta(5 nm)/Cu(8 nm)/Co(0,3 nm)/[Ni(0,9 nm)/Co(0,3 nm)]<sub>4</sub>/NiFe( $t$  nm)/Ta(5 nm), en las cuales el espesor de NiFe varía entre  $t = 0$  a 3 nm. Las películas fueron preparadas sobre un sustrato de Si(100) térmicamente oxidado a temperatura ambiente, utilizando un sistema de deposición confocal en una cámara cuya presión base es inferior a  $4 \times 10^{-8}$  Pa ( $3 \times 10^{-8}$  Torr) a una presión de Ar de 5 mTorr. La tasa de crecimiento fue determinada mediante reflectometría de rayos x el espesor de cada película en la muestra completa fue determinado a partir de la tasa y tiempo de deposición. Las películas semilla de Ta (5 nm)/Cu(8 nm) promueven una orientación (111) con el fin de asegurar una fuerte anisotropía perpendicular en las multicapas de Co/Ni [19].



**Figura 6.5:** Ciclo de histéresis para campo magnético paralelo (a) y perpendicular al plano (b), para un sistema de multicapas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_4/\text{NiFe}(t)$ , con  $t$  variando desde 0 a 3 nm.

La Fig. 6.5a,b ilustra el ciclo de histéresis para campos externos aplicados IP y OP, el cual es medido mediante un magnetómetro de muestra vibrante (VSM) a temperatura ambiente. Los ciclos muestran claramente una transición en la

reorientación de la magnetización a medida que aumenta el espesor de NiFe, tal como muestran las simulaciones. Para espesores de la película de NiFe entre 0 y 2 nm aproximadamente, el sistema  $[\text{Co}/\text{Ni}]_4$  presenta un ciclo de histéresis OP cuadrado y un eje IP difícil, pero para muestras con una película de NiFe de 3 nm aproximadamente, o superiores, la curva IP muestra una baja coercitividad y la curva OP se satura muy lentamente. Por lo tanto, hay una reorientación del eje de fácil magnetización desde OP a IP para espesores de NiFe entre 2 y 3 nm aproximadamente. Las curvas OP en la Fig. 6.5b muestran una remanencia significativa y las muestras con un espesor de NiFe de 0 a 2 nm aproximadamente alcanzan la saturación a valores inferiores a 1.3 kOe aproximadamente.

En resumen, hemos estudiado las propiedades magnéticas de multicapas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}$  con acoplamiento de intercambio en función del espesor de la película de NiFe mediante simulaciones de Monte Carlo, y se han comparado dichos resultados con mediciones experimentales. Hemos encontrado que al incrementar el espesor de la película de NiFe hay un cambio en la orientación del eje fácil desde OP a IP, un proceso que es acompañado por el decrecimiento de la remanencia OP y por cambios en el modo de reversión debido a la influencia de la anisotropía.

El mecanismo de reversión de una película de 100 nm x 300 nm de superficie es diferente según el espesor de la película de NiFe. Cuando el espesor varía entre 0 y 5 nm el proceso de reversión está dominado por la formación y propagación de dominios, mientras que para espesores de entre 10 y 20 nm, la reversión ocurre mediante la formación de vórtices. Estos resultados están en acuerdo cualitativo con los resultados de un modelo unidimensional aplicado por otros grupos para estudiar un sistema de  $[\text{Co}/\text{Pd}]/\text{NiFe}$  [19].

- Los resultados mostrados en este capítulo han dado origen a un manuscrito enviado a Applied Physics Letters con el nombre “Monte Carlo modeling of mixed-anisotropy  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}$  multilayer”, R. A. Escobar, L. Tryputen,

S. Castillo-Sepúlveda, D. Altbir, S. Chung, J. Åkerman, and C. A. Ross.  
L15 – 05521, con fecha 3 de Julio de 2015.

## Capítulo 7

# Conclusiones

---

En el marco de esta tesis se ha realizado un estudio sistemático de diversas nanoestructuras magnéticas rectangulares. Utilizando simulaciones basadas en el método de Monte Carlo y el método de escalamiento fue posible considerar, a temperatura ambiente y en detalle, los procesos de reversión de la magnetización de diferentes estructuras, abordando aspectos diversos como la estabilidad estructural y considerando algunas alternativas para el incremento de la densidad de grabación de información que muestran el potencial impacto de estas estructuras con segmentos rectangulares.

El primer sistema estudiado fueron las estructuras tipo T, un sistema de baja simetría que presenta cuatro estados de mínima energía, en los cuales se observan secciones con magnetizaciones en el plano de la muestra con orientaciones perpendiculares entre sí, separadas por una pared de dominio. La estabilidad de estos estados fue estimada calculando la magnitud de los campos magnéticos necesarios para lograr una transición desde un estado a otro, los que resultan ser del orden o incluso mayor a 1.3 kOe. Ante este valor de campo el sistema presenta estabilidad a temperatura ambiente debido a la fuerte anisotropía configuracional de la estructuras. Los estados analizados son también estables frente a rugosidad y, por consiguiente, muestran que los sistemas de baja simetría podrían ofrecer interesantes posibilidades

para incrementar la densidad de grabación de información.

Es importante destacar que los estudios de estabilidad fueron factibles de realizar debido al método empleado en las simulaciones, ya que otros métodos, por ejemplo basados en una descripción continua de la magnetización, no permiten un estudio detallado del efecto de la rugosidad.

También exploramos los modos de reversión de estas estructuras tipo T, los que están gobernados por la nucleación y propagación de paredes de diferentes tipos, vórtices y antivórtices, que aumentan en cantidad cuando el campo es aplicado a lo largo de ejes de menor simetría. Esto nos permitió identificar una interesante relación entre la complejidad de los modos de reversión y la simetría de la estructura.

El segundo sistema estudiado consiste en multicapas formadas por películas magnéticas separadas por un espaciador no magnético, en la búsqueda de aportar al diseño de sistemas de grabación tridimensional. Mediante cálculos analíticos y simulaciones numéricas encontramos un tamaño crítico que permite tener un comportamiento independiente de cada película magnética, sin aumentar excesivamente la altura de la multicapa, de manera de que pueda ser utilizada como sistema de grabación tridimensional. El modelo analítico predice que, para una distancia de separación de 30 nm, la energía de interacción dipolar entre las películas magnéticas se reduce significativamente, tanto que es posible considerar que cada película se comporta independiente del resto en términos magnéticos. Esto fue comprobado con simulaciones numéricas estableciendo como tamaño crítico los 30 nm, para la geometría y material utilizado en este trabajo. Si bien el sistema estudiado tiene dimensiones específicas, lo relevante es que el método se muestra viable, efectivo y sencillo, pudiendo ser utilizado en el diseño de estos sistemas, cualquiera sean las dimensiones que se definan así como el material magnético que sea utilizado. La densidad de información encontrada en este sistema es del orden de las que muestran sistemas de ultra alta densidad en sistemas actualmente en fase de diseño.

El tercer sistema estudiado son las multicapas de  $[\text{Co}/\text{Ni}]_2/\text{NiFe}$ , con acoplamiento de intercambio entre las películas. En este sistema, y mediante simulaciones de Monte Carlo, estudiamos la anisotropía efectiva que muestran estas estructuras en función del espesor de la película de NiFe. Los cálculos muestran que, al incrementar el espesor de la película de NiFe hay un cambio en la orientación del eje fácil desde fuera del plano de las multicapas al plano. Esto se debe a que la anisotropía en el plano que presenta la muestra debida a su geometría compite con la anisotropía fuera del plano de las películas de Co/Ni. Este proceso es acompañado por una disminución de la remanencia fuera del plano de las películas. Asimismo, los modos de reversión están fuertemente determinados por esta anisotropía efectiva, pudiendo observar el cambio en estos como función del espesor de la película de NiFe. Además es posible observar de forma clara las variaciones en la magnetización durante la relajación. El estudio realizado puede ser aplicado a cualquier tipo de estructura con anisotropía variable.

De esta forma, en el marco de esta tesis se han abordado estructuras rectangulares con diversas geometrías, mostrando la diversidad de sistemas que pueden generarse con esta geometría. El método de Monte Carlo utilizado es totalmente adecuado para estos estudios, pues permite evidenciar en detalle las diferentes estructuras que aparecen durante el proceso de reversión de la magnetización, tales como vórtices, antivórtices, y paredes de dominio de diferente orden. Si bien los procesos de reversión que estas estructuras presentan son complejos, son perfectamente reproducibles, que es el ingrediente más importante a la hora de analizar su aplicabilidad, lo que hace importante revisitarlas para estudiar en detalle sus interesantes propiedades.

# Bibliografía

---

- [1] [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/2007/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2007/). visitado 09-07-2015.
- [2] [https://lib.stanford.edu/files/pasig-jan2012/11B7%20Francis%20PASIG\\_2011\\_Francis\\_final.pdf](https://lib.stanford.edu/files/pasig-jan2012/11B7%20Francis%20PASIG_2011_Francis_final.pdf). visitado 09-07-2015.
- [3] <https://www.hgst.com/science-of-storage/next-generation-data-centers/10tb-smr-helioseal-hdd>. visitado 09-07-2015.
- [4] <http://www.seagate.com/la/es/internal-hard-drives/enterprise-hard-drives/hdd/enterprise-capacity-3-5-hdd/>. visitado 09-07-2015.
- [5] <https://wdc.com/wdproducts/library/other/2579-701185.pdf>. visitado 09-07-2015.
- [6] <http://www.research.ibm.com/labs/zurich/sto/tape/arealdensity.html>. visitado 09-07-2015.
- [7] D. A. Allwood, Gang Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. P. Cowburn. Magnetic domain-wall logic. *Science*, 309(5741):1688, 2005.

- 
- [8] M. Bahiana, F. S. Amaral, S. Allende, and D. Altbir. Reversal modes in arrays of interacting magnetic Ni nanowires: Monte Carlo simulations and scaling technique. *Physical Review B*, 74:174412, 2006.
- [9] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Van Dau, Nguyen, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 61:2472, 1988.
- [10] G. Binasch, P. Gränberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, 39:4828, 1989.
- [11] K. Binder and D. Heermann. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [12] T. Blachowicz and A. Ehrmann. Fourfold nanosystems for quaternary storage devices. *Journal of Applied Physics*, 110(7):073911, 2011.
- [13] T. Blachowicz and A. Ehrmann. Six-state, three-level, six-fold ferromagnetic wire system. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 331(0):21, 2013.
- [14] P. J. H. Bloemen, M. T. Johnson, M. T. H. van de Vorst, R. Coehoorn, J. J. de Vries, R. Jungblut, J. aan de Stegge, A. Reinders, and W. J. M. de Jonge. Magnetic layer thickness dependence of the interlayer exchange coupling in (001) Co/Cu/Co. *Physical Review Letters*, 72:764, 1994.
- [15] M. T. Bryan, S. Bance, J. Dean, T. Schrefl, and D. A. Allwood. Transverse and vortex domain wall structure in magnetic nanowires with uniaxial in-plane anisotropy. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(2):024205, 2012.

- 
- [16] F. J. Castaño, Y. Hao, M. Hwang, C. A. Ross, B. Vögeli, Henry I. Smith, and S. Haratani. Magnetization reversal in sub-100 nm pseudo-spin-valve element arrays. *Applied Physics Letters*, 79(10):1504, 2001.
- [17] F. J. Castaño, D. Morecroft, and C. A. Ross. Low-field giant magnetoresistance in layered magnetic rings. *Physical Review B*, 74:224401, 2006.
- [18] F. J. Castaño, D. Morecroft, W. Jung, and C. A. Ross. Spin-dependent scattering in multilayered magnetic rings. *Physical Review Letters*, 95(13):137201, 2005.
- [19] Sunjae Chung, S. M. Mohseni, V. Fallahi, T. N. Anh Nguyen, N. Benatmane, R. K. Dumas, and Johan Åkerman. Tunable spin configuration in [Co/Ni]–NiFe spring magnets. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 46(12):125004, 2013.
- [20] E. Cisternas and E. E. Vogel. Improving information storage by means of segmented magnetic nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 388(0):35, 2015.
- [21] R. P. Cowburn. Property variation with shape in magnetic nanoelements. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 33(1):R1, 2000.
- [22] B. D. Cullity and C. D. Graham. *Introduction to Magnetic Materials*. Wiley, 2009.
- [23] J. d'Albuquerque e Castro, D. Altbir, J. C. Retamal, and P. Vargas. Scaling approach to the magnetic phase diagram of nanosized systems. *Physical Review Letters*, 88:237202, 2002.
- [24] W. R. Deskins, G. Brown, S. H. Thompson, and P. A. Rikvold. Kinetic monte carlo simulations of a model for heat-assisted magnetization reversal in ultrathin films. *Physical Review B*, 84:094431, 2011.

- 
- [25] Jian Dou, Michael J. Pechan, E. Shipton, N. Eibagi, and E. E. Fullerton. Tunable resonant properties of perpendicular anisotropy [Co/Pd]/Fe/[Co/Pd] multilayers. *Journal of Applied Physics*, 113(17):17C115, 2013.
- [26] Randy K. Dumas, Thomas Gredig, Chang-Peng Li, Ivan K. Schuller, and Kai Liu. Angular dependence of vortex-annihilation fields in asymmetric cobalt dots. *Physical Review B*, 80:014416, 2009.
- [27] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, M. Bahiana, and J. d'Albuquerque e Castro. Magnetic properties of layered nanorings. *Applied Physics letters*, 89(13):132501, 2006.
- [28] T. J. Fal, J. I. Mercer, M. D. Leblanc, J. P. Whitehead, M. L. Plumer, and J. van Ek. Kinetic monte carlo approach to modeling thermal decay in perpendicular recording media. *Physical Review B*, 87:064405, 2013.
- [29] C. A. Ferguson, D. A. MacLaren, and S. McVitie. Metastable magnetic domain walls in cylindrical nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 381(0):457–462, 2015.
- [30] Y. Gong, Z. Cevher, M. Ebrahim, J. Lou, C. Pettiford, N. X. Sun, and Y. H. Ren. Determination of magnetic anisotropies, interlayer coupling, and magnetization relaxation in FeCoB/Cr/FeCoB. *Journal of Applied Physics*, 106(6):063916, 2009.
- [31] Georg Heldt, Matthew T. Bryan, Gino Hrkac, Stephanie E. Stevenson, Rajesh V. Chopdekar, Jörg Raabe, Thomas Thomson, and Laura J. Heyderman. Topologically confined vortex oscillations in hybrid [Co/Pd]8-permalloy structures. *Applied Physics Letters*, 104(18), 2014.
- [32] Riccardo Hertel. Computational micromagnetism of magnetization processes in nickel nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 249(12):251, 2002. International Workshop on Magnetic Wires.

- 
- [33] Yu-feng Hou, Qing-feng Zhan, and Kannan M. Krishnan. Magnetization reversal in exchange biased IrMn/Fe ring arrays. *Applied Physics Letters*, 98(4):042510, 2011.
- [34] D. Houssameddine, U. Ebels, B. Delaët, B. Rodmacq, I. Firastrau, F. Ponthenier, M. Brunet, C. Thirion, J.-P. Michel, L. Prejbeanu-Buda, M.-C. Cyrille, O. Redon, and B. Dieny. Spin-torque oscillator using a perpendicular polarizer and a planar free layer. *Nature Materials*, 6:447, 2007.
- [35] Jia-mian Hu, Zheng Li, Long-Qing Chen, and Ce-Wen Nan. High-density magnetoresistive random access memory operating at ultralow voltage at room temperature. *Nature communications*, 2:553, 2011.
- [36] Yu P. Ivanov, M. Vázquez, and O. Chubykalo-Fesenko. Magnetic reversal modes in cylindrical nanowires. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 46(48):485001, 2013.
- [37] Won-Cheol Jeong, Byung-Il Lee, and Seung-Ki Joo. Three level, six state multilevel magnetoresistive ram(mram). *Journal of Applied Physics*, 85(8):4782, 1999.
- [38] G. Kartopu, O. Yalçın, K-L. Choy, R. Topkaya, S. Kazan, and B. Aktaş. Size effects and origin of easy-axis in nickel nanowire arrays. *Journal of Applied Physics*, 109(3):033909, 2011.
- [39] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8th edition, 2004.
- [40] H. Kronmüller and S. Parkin. *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, volume 5. John Wiley & Sons, 2007.
- [41] Reinoud Lavrijsen, Ji-Hyun Lee, Amalio Fernández-Pacheco, Dorothée C. M. C. Petit, Rhodri Mansell, and Russell P. Cowburn. Magnetic ratchet for three-dimensional spintronic memory and logic. *Nature*, 493:647, 2013.

- 
- [42] T. R. McGuire and R. I. Potter. Anisotropic magnetoresistance in ferromagnetic 3d alloys. *IEEE Transactions on Magnetics*, 11(4):1018, 1975.
- [43] J. Mejía-López, D. Altbir, A. H. Romero, X. Batlle, Igor V. Roshchin, Chang-Peng Li, and Ivan K. Schuller. Vortex state and effect of anisotropy in sub-100-nm magnetic nanodots. *Journal of Applied Physics*, 100(10):104319, 2006.
- [44] José Mejía-López, D. Altbir, and Iván K. Schuller. Relaxation times in exchange-biased nanostructures. *Applied Physics Letters*, 83(2):332, 2003.
- [45] J. Mejía-López, D. Altbir, P. Landeros, J. Escrig, A. H. Romero, Igor V. Roshchin, C.-P. Li, M. R. Fitzsimmons, X. Batlle, and Ivan K. Schuller. Development of vortex state in circular magnetic nanodots: Theory and experiment. *Physical Review B*, 81:184417, 2010.
- [46] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087, 1953.
- [47] Nicholas Metropolis and S. Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335, 1949.
- [48] J. Moritz, G. Vinai, S. Auffret, and B. Dieny. Two-bit-per-dot patterned media combining in-plane and perpendicular-to-plane magnetized thin films. *Journal of Applied Physics*, 109(8):083902, 2011.
- [49] D. Navas, J. Torrejon, F. Béron, C. Redondo, F. Batallan, B. P. Toperverg, A. Devishvili, B. Sierra, F. Castaño, K. R. Pirota, and C. A. Ross. Magnetization reversal and exchange bias effects in hard/soft ferromagnetic bilayers with orthogonal anisotropies. *New Journal of Physics*, 14(11):113001, 2012.

- 
- [50] R. F. Neumann, M. Bahiana, N. M. Vargas, D. Altbir, S. Allende, D. Görlitz, and K. Nielsch. Domain wall control in wire-tube nanoelements. *Applied Physics Letters*, 102(20):202407, 2013.
- [51] Harald Oezelt, Alexander Kovacs, Franz Reichel, Johann Fischbacher, Simon Bance, Markus Gusenbauer, Christian Schubert, Manfred Albrecht, and Thomas Schrefl. Micromagnetic simulation of exchange coupled ferri-ferromagnetic heterostructures. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 381(0):28, 2015.
- [52] Jesús G. Ovejero, Cristina Bran, Enrique Vilanova, Jürgen Kosel, María P. Morales, and Manuel Vazquez. Electrochemical synthesis of core-shell magnetic nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 389(0):144, 2015.
- [53] Stuart S. P. Parkin, Masamitsu Hayashi, and Luc Thomas. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873):190, 2008.
- [54] M. L. Plumer, J. van Ek, and D. Weller, editors. *The Physics of Ultra-High-Density Magnetic Recording*, volume 41 of *Springer Series in Surface Sciences*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2001.
- [55] William H. Rippard, Alina M. Deac, Matthew R. Pufall, Justin M. Shaw, Mark W. Keller, Stephen E. Russek, Gerrit E. W. Bauer, and Claudio Serpico. Spin-transfer dynamics in spin valves with out-of-plane magnetized CoNi free layers. *Physical Review B*, 81:014426, 2010.
- [56] Igor V. Roshchin, Chang-Peng Li, Harry Suhl, Xavier Batlle, S. Roy, Sunil K. Sinha, S. Park, Roger Pynn, M. R. Fitzsimmons, Jose Mejía-López, Dora Altbir, A. H. Romero, and Ivan K. Schuller. Measurement of the vortex core in sub-100 nm Fe dots using polarized neutron scattering. *Europhysics Letters*, 86(6):67008, 2009.

- 
- [57] Maria Patricia Rouelli Sabino, Michael Tran, Cheow Hin Sim, Ying Ji Feng, and Kwaku Eason. Seed influence on the ferromagnetic resonance response of Co/Ni multilayers. *Journal of Applied Physics*, 115(17):17C512, 2014.
- [58] I. Sendur and D. Weller. Optimized media grain packing fraction for bit patterned magnetic recording media, 2005. US Patent App. 11/050,919.
- [59] Philip Sergelius, Josep M Montero Moreno, Wehid Rahimi, Martin Waleczek, Robert Zierold, Detlef Görlitz, and Kornelius Nielsch. Electrochemical synthesis of highly ordered nanowires with a rectangular cross section using an in-plane nanochannel array. *Nanotechnology*, 25(50):504002, 2014.
- [60] Laura Thevenard, Huang Tao Zeng, Dorothée Petit, and Russell P. Cowburn. Macrospin limit and configurational anisotropy in nanoscale permalloy triangles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 322(15):2152, 2010.
- [61] Larysa Tryputen, Feng Guo, Frank Liu, T. N. Anh Nguyen, Majid S. Mohseni, Sunjae Chung, Yeyu Fang, Johan Åkerman, R. D. McMichael, and Caroline A. Ross. Magnetic structure and anisotropy of  $[\text{Co/Pd}]_5/\text{NiFe}$  multilayers. *Physical Review B*, 91:014407, 2015.
- [62] N. M. Vargas, S. Allende, B. Leighton, J. Escrig, J. Mejía-López, D. Altbir, and Ivan K. Schuller. Asymmetric magnetic dots: A way to control magnetic properties. *Journal of Applied Physics*, 109(7), 2011.
- [63] P. Vargas and D. Altbir. Dipolar effects in multilayers with interface roughness. *Physical Review B*, 62:6337, 2000.
- [64] P. Vargas, D. Altbir, and J. d'Albuquerque e Castro. Fast Monte Carlo method for magnetic nanoparticles. *Physical Review B*, 73:092417, 2006.

- 
- [65] P. Vavassori, D. Bisero, F. Carace, A. di Bona, G. C. Gazzadi, M. Liberati, and S. Valeri. Interplay between magnetocrystalline and configurational anisotropies in Fe (001) square nanostructures. *Physical Review B*, 72:054405, 2005.
- [66] V. Yu. Vinnichenko, L. A. Fomin, I. V. Malikov, and G. M. Mikhailov. Size and orientation effect on micromagnetic states in rectangular epitaxial Fe (011) microstructures. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 385(0):451, 2015.
- [67] L. G. Vivas, M. Vazquez, J. Escrig, S. Allende, D. Altbir, D. C. Leitao, and J. P. Araujo. Magnetic anisotropy in CoNi nanowire arrays: Analytical calculations and experiments. *Physical Review B*, 85:035439, 2012.
- [68] Di Wu, Shaohai Chen, Zongzhi Zhang, B. Ma, and Q. Y. Jin. Enhancement of perpendicular magnetic anisotropy in Co/Ni multilayers by in situ annealing the Ta/Cu under-layers. *Applied Physics Letters*, 103(24):242401, 2013.
- [69] Kuo-Ming Wu, Lance Horng, Jia-Feng Wang, Jong-Ching Wu, Yin-Hao Wu, and Ching-Ming Lee. Influence of asymmetry on vortex nucleation and annihilation in submicroscaled permalloy disk array. *Applied Physics Letters*, 92(26):262507, 2008.
- [70] Hui-Zhong Xu, Xiao Chen, Jing Hua, and Jun-Ming Liu. Minimal switching voltage for magnetization reversals in asymmetric nanorings. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321(22):3698, 2009.
- [71] Jian-Gang Zhu. Magnetoresistive random access memory: The path to competitiveness and scalability. *Proceedings of the IEEE*, 96(11):1786, 2008.
- [72] Jian-Gang Zhu, Youfeng Zheng, and Gary A. Prinz. Ultrahigh density vertical magnetoresistive random access memory. *Journal of Applied Physics*, 87(9):6668, 2000.