UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE FACULTAD DE CIENCIA Departamento de Física

PROPIEDADES FUNDAMENTALES DE SISTEMAS NANÓMETRICOS CON ALTA SIMETRÍA

Sebastián Rodrigo Castillo Sepúlveda

Profesor Guía: Dora Altbir Drullinsky

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN FÍSICA

Santiago - Chile

2016

© Sebastián Rodrigo Castillo Sepúlveda, 2016 Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial Chile 3.0

PROPIEDADES FUNDAMENTALES DE SISTEMAS NANÓMETRICOS CON ALTA SIMETRÍA

Este trabajo de Graduación fue preparado bajo la supervisión del profesor 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	
Dr. Samuel Baltazar	
Dr. Fernando Mendez	
Dr. Alvaro Nuñez	
Dr. Patricio Vargas	

Director Departamento de Física

Resumen

Durante los últimos años, diversas nanoestructuras tales como discos, hilos, y tubos han sido intensamente investigadas. Sin embargo, y a pesar de un intenso trabajo, subsisten, particularmente a escalas de tamaño pequeñas, de 100 nm o menos, una gran diversidad de temas que no han sido suficientemente explorados.

Uno de los sistemas escasamente estudiados son las partículas con forma de estadio, en las cuales la complejidad asociada al preciso control experimental de su geometría, ha dificultado un estudio experimental sistemático. Estas partículas son el objeto del primer trabajo de esta tesis, el cual se enfoca en el estudio sistemático de los procesos de reversión de la magnetización como función del tamaño. Nuestros resultados permitieron la identificación y comprensión de diferentes mecanismos de reversión. En estructuras pequeñas, casi circulares, la reversión ocurre mediante la formación de un vórtice aislado, mientras que en estructuras de mayor tamaño, los modos de reversión involucran la propagación de dos vórtices, que generan un anti vórtice central o una región central con forma de diamante, dependiendo de la región donde nuclean los dos vórtices. Nuestros resultados, que permiten entender el por qué de la nucleación de los diferentes modos, pueden ser utilizados como una guía para el uso de partículas con forma de estadio.

El segundo de los trabajos desarrollados en esta tesis aborda los mecanismos de reversión de la magnetización en anillos pequeños. En estos, y en función de su geometría, identificamos cuatro modos de reversión, los que generan, en algunos casos, curvas de histéresis muy similares. Si bien las curvas de histéresis nos entregan información importante sobre el proceso de reversión, en general no evidencian el modo de reversión, lo que usualmente se identifica a partir de imágenes de MFM o MOKE. También se utiliza el análisis de curvas FORC, lo que requiere de realizar varios ciclos de histéresis (completos e incompletos). En nuestro trabajo mostramos que el uso de la técnica de imágenes y la de curvas FORC puede ser reemplazado por la generación de curvas de susceptibilidad, las que nos permiten identificar de manera precisa los modos de reversión. De esta forma, la susceptibilidad puede convertirse en una valiosa herramienta para el análisis de los procesos de reversión, tanto desde el punto de vista teórico como experimental.

El último trabajo abordado en el marco de esta tesis considera cadenas unidi-

mensionales de momentos magnéticos sujetos a diversas interacciones, tales como dipolar, intercambio antiferromagnético y anisotropías locales. Al respecto buscamos, mediante cálculos analíticos y numéricos, las estructuras en equilibrio estable mediante la combinación de diferentes interacciones y condiciones de frontera. Según las condiciones, nuestros cálculos muestran que es posible estabilizar estructuras helicoidales tipo solitones a temperatura finita en cadenas con número par e impar de sitios atómicos. Esto nos permite explicar algunos resultados experimentales recientemente reportados al respecto en estructuras atómicas de hierro en cobre (111) [Popov et al., 2015].

De esta forma, en los tres sistemas estudiados hemos identificado interesantes comportamientos, que pueden ayudar a que estas estructuras puedan ser utilizadas en aplicaciones específicas propias de las estructuras magnéticas de tamaño nanométrico.

Abstract

In recent years, several nanostructures such as discs, wires and tubes have been intensively investigated. However, despite intense work, particularly for sizes of 100 nm or less, a wide range of problems are still open.

One of the systems scarcely studied are the stadium shaped particles, in which the complexity associated with precise experimental control in their geometry has hampered a systematic experimental study. These particles are the subject of the first work of this thesis, which focuses on the systematic study of the mechanisms of magnetization reversal as a function of size. Our results allow the identification and understanding of different reversal mechanisms. In small structures of almost circular shape, the reversal occurs by formation of a single vortex. For larger structures, the reversal modes involve the propagation of two vortices, which generate a central antivortex, or a central region with a diamond-like domain, depending on the region where the two vortices nucleate. Our results allow to understand the nucleation and propagation of different modes, and can be used as a guide for the use of stadium shaped particle.

The second work developed in this thesis is focused on the mechanisms of magnetization reversal in small rings. In these rings, and depending on their geometry, we identified four reversal modes, which generate, in some cases, very similar hysteresis loops. Although the hysteresis curves give us important information about the reversal process generally they do not show the reversal mode, which is usually identified from MFM or MOKE images. FORC analysis is also used, which requires performing several cycles of hysteresis (complete and incomplete). In our work we show that the use of imaging technique and FORC analysis can be replaced by the susceptibility curves, which allow to identify with high accuracy the reversal modes. Thus, the susceptibility can become a valuable tool for the analysis of the reversal mechanisms, both from the theoretical and experimental point of view.

The third work developed in this thesis is focused on one-dimensional magnetic chains subject to various interactions such as dipolar, antiferromagnetic exchange and local anisotropies. Using analytical and numerical calculations, we seek the stable equilibrium configurations for particular interactions and boundary conditions. Depending on conditions, our calculations show that it is possible to stabilize helical and soliton-like configurations at finite temperature in chains with even and odd number of atomic sites. This allows to explain some experimental results concerning a peculiar magnetic behavior recently reported for atomic structures of iron in copper (111) [Popov et al., 2015].

Thus, in the three systems presented we have been able to identify interesting behaviors that can be used in specific applications of magnetic structures at the nano metric size.

Dedicado a mi familia

Agradecimientos

Primeramente me gustaría agradecer a la Dra. Dora Altbir D. quien ha sido mi tutora, y me ha guiado no sólo en el doctorado, sino también en el pregrado, cuando comencé a trabajar con ella. Sin duda, fue en gran parte gracias a su ayuda y dedicación que puedo finalizar esta etapa de mis estudios tan importante. También me gustaría agradecer de manera especial al Dr. Sebastian Allende, de quien aprendí muchas cosas, tanto de magnetismo como de la vida.

También quisiera agradecer a mis compañeros de grupo, Nicolás Vargas y Roberto Escobar, quienes ya son doctores, con quienes pasamos la mayor parte del doctorado. De ellos no sólo aprendí mucho, sino que también pasamos buenos y muy agradables momentos. También debo agradecer a todos con los que compartí, tanto en el pregrado como en el postgrado, con quienes intentamos pasar lo complicado de esta carrera de una manera más amena y amable.

Me gustaría agradecer al Dr. Francisco Muñoz, al Dr. Juan Escrig, a la Dra. Elena Vedmedenko, al Dr. Jose d'Albuquerque e Castro, a la Dra. Mónica Bahiana, al Dr. Kornelius Nielsch, al Dr. Deflet Gorlitz y al Dr. Vagson Carvalho, con quienes trabajé y aprendí mucho en muy diversas formas. También me gustaría agradecer a la Dra. Ingrid Mertig y a su grupo en el instituto Max Planck en la University Martin Luther, Halle-Salle, Alemania, por haberme recibido en el 2013. También le agradesco al Dr. Vitaliy Lomakin, y a su grupo en el Center of Magnetic Recording Research (CMRR) en la Universidad de California San Diego, California, Estados Unidos por aceptarme como alumno pasante en 2015.

Quisiera agradecer a todos aquellos formaron parte de mi proceso educativo, tanto a los profesores de pregrado como a los de postgrado.

También me gustaría agradecer a mi familia, a mis padres Iván y Sandra, y a mis hermanos Iván y Benjamin, que siempre me dieron su apoyo incondicional, a Baby, Sole y la Sra. Charo por estar siempre presentes, y muy en especial a Rosa Corona por estar siempre conmigo en los buenos y malos momentos, y a mi hija Constanza por llenarme de alegría y más ganas de superarme por ella. Finalmente, me gustaría agradecer a Conicyt y a la Universidad de Santiago de Chile, quienes financiaron mi doctorado, al Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología (CEDENNA) y al Núcleo Milenio de Magnetismo Básico y Aplicado, por todo el apoyo dado, no sólo durante el doctorado, sino desde mi ingreso al Grupo de Magnetismo, tanto en mi formación profesional, como en el financiamiento para la asistencia a congresos y escuelas.

Tabla de Contenido

1	Intro	oducción	1
2	Prin	icipios Fundamentales del Magnetismo	8
	2.1	Energías involucradas	12
		2.1.1 Energía de Zeeman	12
		2.1.2 Energía de Intercambio	12
		2.1.3 Energía Dipolar	13
		2.1.4 Energía de Anisotropía	14
	2.2	Configuraciones de la magnetización	16
		2 2 1 Paredes de dominios	17
		2.2.1 Vártices v antivártices	19
	23		21
	2.0	2.3.1 Efectos de la temporatura	23
	2 1	Adde de Eccelemiente	20
	2.4		23
3	Med	ánismos de reversión en partículas con forma de estadio	25
	3.1		25
	3.2	Modelo	27
	3.3	Resultados	28
	3.4	Conclusiones	36
4	Мос	los de reversión en anillos pequeños: Patrones en la susceptibilidad	37
	4.1		37
	4.2	Modelo	39
	4.3	Resultados	41
		4.3.1 Modos conteniendo la nucleación de un vórtice	42
		4.3.2 Modos que no contienen la nucleación de un vórtice	44
	4.4	Conclusiones	48
_			
5	Esta	ados magneticos metaestables no colineales en cadenas antiferromagné-	-
	tica	S	50
	5.1		50

	5.2 5.3 5.4	Modelo	52 59 63
6	Con	clusiones generales	64
Re	ferer	ncias Bibliográficas	66
A	Cálc	ulo de energía en cadenas cerradas.	73
	A.1	Configuración tipo hélice magnética	73
	A.2	Configuración tipo solitón.	74
		A.2.1 N par, M par	74
		A.2.1.1 N par, M impar	75
		A.2.2 <i>N</i> impar, <i>M</i> impar	76

IX

Índice de Tabla

1.1	Tiempo de relajación superparamagnética para partículas de cobalto	7
2.1	Momento magnético de algunos materiales magnéticos	8
2.2	Susceptibilidad magnética de algunos materiales paramagnéticos y diamag-	
	néticos	9
2.3	Parámetros de los dominios magnéticos para algunos materiales ferromag-	
	néticos	19
3.1	Modos de reversión de la magnetización observados en una nanoestructura	
	con forma de estadio para diferentes tamaños	36

Índice de Ilustraciones

1.1 1.2 1.3 1.4	Dominios magnéticos	2 3 4 5
2.1	Comportamiento de la magnetización en materiales diamagnéticos y para- magnéticos	10
2.2 2.3	Curva de histéresis de un material ferromagnético	11
	rromagneto	14
2.4 2.5	Momento dipolar y sus líneas de campo	15
2.0	energía dipolar	17
2.6	Multidominios en un material ferromagnético	18
2.7	Configuración de la magnetización en la pared de Bloch y la pared de Néel .	18
2.8	Configuración de los momentos magnéticos en un estado vórtice	19
2.9	Quiralidad y polaridad en un vortice	20
2.10	Técnica del escalamiento	21
3.1 3.2	Parámetros geométricos de un estadio $\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$ Instantáneas del proceso de reversión de un estadio con $S = 80$ nm para	26
3.3	diferentes valores de campo (muestra el modo V)	29
	diferentes valores de campo (muestra el modo VV)	30
3.4	Representación de los puntos A y B en un estadio	30
3.5	Instantáneas del proceso de reversión de un estadio con $S=160~{ m nm}$ para	
	diferentes valores de campo (muestra el modo VAV)	31
3.6	Representación esquemática de un vórtice, dos vórtices, y dos vórtices y un antivórtice	32
3.7	Representación esquemática de un antivórtice	33

3.8 3.9	Representación esquemática de un antivórtice en función de la quiralidad de los vórtices que lo forman	34 35
4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7	Representación esquemática del modo "cebolla"	38 39 41 42 42 43
4.8 4.9 4.10 4.11 4.12	(DWV)	43 45 45 46 46 47
5.1 5.2 5.3	Configuración AFM, AFSS y KS Energía interna de un estado puro AFSS para N par o impar Diferencia entre las energías internas del estado AFSS y el estado KS para N = 31, J = 1, y diferentes valores de K . Y tamaños del solitón como función de la anisotropía para $N = 21$	51 53
5.4 5.5 5.6 5.7 5.8 5.9 5.10	Resultados analíticos de la energía interna y la energía libre de Gibbs Estados magnéticos colineales en cadenas de cuatro momentos magnéticos Configuración de un vórtice para un anillo con $N = 50$ (interacción dipolar) . Configuración de la magnetización del anillo con $K < 0$ y $K > 0$ Configuración antiferromagnética AFM	56 58 59 60 60 61 62

Capítulo 1 Introducción

Las propiedades magnéticas de nanoestructuras es un tema de gran relevancia científica y tecnológica en la actualidad. El interés en estos sistemas surge por las potenciales aplicaciones de estos en dispositivos lógicos, memorias magnéticas no volátiles, sensores magnéticos de alta resolución, resonadores de microondas, filtros, guías de onda y una nueva generación de grabación de ultra alta densidad [Sun et al., 2000, Gerrits et al., 2002, Chapman et al., 1998, Ross, 2001]. Esta gran diversidad de aplicaciones se basa en una de las características más importantes de la magnetización, esto es la capacidad que tienen ciertos materiales, llamados ferromagnetos, de tener una magnetización residual o remanente, incluso en ausencia de un campo magnético externo.

En un cuerpo magnético la magnetización usualmente presenta regiones, de tamaños del orden de los 100 nm, en las cuales la magnetización está orientada a lo largo de una dirección dada. Cada región en la cual la magnetización presenta un ordenamiento se denomina dominio magnético, mientras que las regiones que están entre dominios se les conoce como paredes de dominio, como se observa en la figura 1.1. La forma de estos dominios magnéticos, y el comportamiento de las paredes de dominio en ausencia de campos externos o cuando están sometidas a corrientes eléctricas o campos magnéticos, ha sido objeto de intenso estudio. Uno de los mayores retos tecnológicos asociados a los dominios es encontrar formas más eficaces de mantenerlos estables, particularmente frente a altas temperaturas.

Los dominios magnéticos juegan un rol fundamental al hablar de grabación de información. El proceso de almacenamiento de información consta fundamentalmente de tres etapas:

 Grabación Magnética: Es el proceso mediante el cual una película de un material ferromagnético granular, cuyos granos tienen una magnetización aleatoria, se ordena siguiendo un cierto patrón, acorde a la información que se desee grabar. Este proceso se realiza magnetizando ciertas regiones de la película ferromagnética en una de



Figura 1.1: Representación esquemática de dos dominios magnéticos separados por una pared de dominios.

dos direcciones opuestas, generando lo que se denomina un bit binario.

- 2. **Almacenamiento:** Es el proceso en el cual la información grabada debe mantenerse en el tiempo. Tiene relación con la estabilidad que presentan los medios granulares frente a la temperatura o campos magnéticos externos débiles. Se espera que la información permanezca estable el mayor tiempo posible.
- 3. Lectura: Es el proceso por el cual la información almacenada en una película magnética se traduce a corriente alterna en una dirección u otra, dependiendo de la dirección de las regiones magnetizadas. Para ello se utilizan cabezales de lectura, de diferentes tipos, que permiten transformar la magnetización en corriente eléctrica.

Durante muchos años se utilizó una cinta magnética como sistema de grabación, pero en las últimas décadas se comenzó a utilizar el disco duro que resulto ser más rápido que la cinta magnética. El primer disco duro magnético conocido, el Ramac I (1956), fue diseñado por IBM para su computadora IBM 350, y aunque su tamaño era más grande que un refrigerador y pesaba una tonelada, apenas podía almacenar 5 Mb de información. Actualmente el disco duro PX3010E-1HQ0 (2015) de Toshiba tiene sólo 3.5 pulgadas de lado, un peso de 720 gr, y puede almacenar 5 Tb de información. Esta gigantesca reducción de tamaño e incremento en la densidad de información ha sido posible debido a grandes avances en las técnicas de fabricación que han logrado reducir drásticamente el tamaño de cada región magnética, pero también gracias a importantes avances en los sistemas de lectura.



Figura 1.2: Magnetorresistencia Gigante. Si una corriente atraviesa un sistema como en (a), entonces su resistencia será alta, mientras que en un sistema como en (b), la resistencia será baja. En la figura, la magnetización de los films es en el plano, con una magnetización "up" (rojo), "down" (azul) y un separador no magnético (verde).

En 1991, IBM lanzó un disco duro cuyo cabezal funcionaba a base a la magnetorresistencia anisotrópica (AMR), que considera la diferencia en la resistencia debida al ángulo que hay entre la dirección de los momentos magnéticos de los granos en la película, y la dirección en que fluye la corriente eléctrica. La diferencia en las corrientes eléctricas obtenidas entre un bit y otro, es de un orden de magnitud en la corriente. En 1997, la misma empresa presentó un disco duro con un cabezal basado en una válvula de espín. La válvula de espín es un dispositivo que funciona en base a magnetorresistencia gigante [Binasch et al., 1989, Baibich et al., 1988] y su creación significó un hito en la historia de la grabación magnética puesto que, al facilitar la lectura, permitió una mayor reducción del tamaño de las regiones magnéticas en que se graba sin perder fidelidad en la lectura de información. La magnetorresistencia gigante ocurre cuando una corriente eléctrica atraviesa un sistema de multicapas formado por dos regiones magnéticas separadas por un material metálico no magnético. Dependiendo de la configuración de la magnetización (ver figura 1.2), la resistencia variará dramáticamente, desde una muy baja resistencia ("0"), a una muy alta resistencia ("1"). Este efecto resultó ideal para los cabezales de lectura de los discos duros modernos, pues es capaz de identificar, mediante la medición de la resistencia de una corriente eléctrica, si la magnetización apunta en una u otra dirección.

A pesar de las ventajas de este sistema de lectura, otros sistemas de grabación han sido explorados. En la década pasada, se propuso, por ejemplo, un nuevo tipo de memoria, la "race track memory" [Parkin et al., 2008], en la que las regiones magnéticas se



Figura 1.3: Race Track Memory: Una propuesta para una memoria utilizando el movimiento de paredes de dominio [Parkin et al., 2008].

moverían como en una pista de autos, mediante la aplicación de una corriente eléctrica, de forma que se generarían en un extremo de una cinta, y luego se moverían por esta, como muestra la figura 1.3.

Una alternativa a los medios de almacenamiento tradicionales y a las race track memory son aquellos en los que potencialmente un bit puede ser representado por una estructura magnética de tamaño nanométrico, aumentando la densidad de información por unidad de área.

Las técnicas de síntesis han permitido controlar de manera eficiente la geometría de diversas nanoestructuras magnéticas, con un énfasis particular en las estructuras cilíndricas de gran longitud. Por ejemplo en el trabajo realizado por Huang *et al.* [Huang et al., 2008] se reporta la síntesis de arreglos de hilos de cobalto de 40 nm de diámetro y 40 μ m de longitud crecidos utilizando electrodeposición en láminas de alúmina porosa, con un gran control del crecimiento y orientación de los elementos. También Rivas *et al.* [Rivas et al., 2002] sintetizaron arreglos de hilos de cobalto de 7 μ m de longitud, y estudiaron sus curvas de histéresis para diámetros de poros de entre 200 y 400 nm, y diferentes separaciones entre los hilos de entre 480 y 830 nm. Estas nanoestructuras se caracterizan por tener una razón de aspecto $\gamma = L/D$ muy grande, con L la longitud del hilo y D el diámetro y, por consiguiente, la magnetización tiende a alinearse a lo largo del eje del hilo, ofreciendo dos direcciones posibles, conocidas como up y down.

También se han sintetizado estructuras cilíndricas con una razón de aspecto $\gamma < 1$ usando litografía de haz de electrones (EBL, por sus siglas en inglés). Este tipo de geometrías han sido estudiadas ampliamente debido a que ofrecen un potencial para dispositivos de grabación magnética de alta densidad [Prinz, 1999, Zhu et al., 2000] con una magnetización en el plano de la estructura. Por ejemplo, C.A.F. Vaz *et al.* en [Vaz et al., 2002], prepararon anillos magnéticos de cobalto (100) epitaxial con un espesor que varía entre los 5 y 34 nm, y un diámetro externo que varía entre los 0.9 y 1.6 μ m. Los autores mostraron la existencia de dos estados estables para la remanencia, el estado cebolla y el estado vórtice. En [Heyderman et al., 2005] L. J. Heyderman *et al.* sintetizaron estructuras magnéticas con forma de herradura (3/4 de anillo), de diámetro externo 1.65 μ m y diámetros internos de entre 0.95 y 1.55 μ m, dispuestas en un arreglo cuya separación es de 100 nm. En estas estructuras encontraron nuevamente configuraciones similares a las observadas en anillos: vórtices y paredes de dominios head-to-head.

Los discos cilíndricos magnéticos también han sido ampliamente estudiados. Un importante trabajo en esta geometría fue desarrollado por T. Shinjo *et al.* [Shinjo et al., 2000] usando MFM para caracterizar discos magnéticos de permalloy (NiFe) con un radio de entre 300 nm y 1 μ m, y un espesor de 50 nm. En este estudio observaron la existencia de un vórtice magnético con una componente de la magnetización fuera del plano en la región central del disco, como se observa en la figura 1.4, mostrando que el radio de este región central llamada core no depende del diámetro del disco.



1 µm

Figura 1.4: Imagen de MFM de vórtices magnéticos en nanodiscos de diferentes diámetros, entre 0.1 y 1 μ m después de aplicar un campo externo de 1.5 T en una dirección en el plano [Shinjo et al., 2000].

También existen otras geometrías en las que pueden aparecer vórtices, tales como en las islas magnéticas de hierro crecidas en W(100), estudiadas por M. Bode *et al.* en [Bode et al., 2004]. Su escasa altura, de entre 3 y 10 nm, y sus dimensiones en el plano de $250 \text{ nm} \times 500 \text{ nm}$ en las direcciones [110] y [001], respectivamente, aseguran una magnetización en el plano. Usando UHV-STM a una temperatura de 14 K en algunas islas se observaron hasta dos vórtices, con un monodominio con forma de diamante entre ambos vórtices.

Podría pensarse que las limitaciones para grabar información en estas estructuras cada vez con mayor densidad provienen de las técnicas de síntesis de las estructuras. Sin embargo esto no es así, pues existe un límite físico a la hora de utilizar estructuras muy pequeñas para grabar información. Si consideramos una partícula de volumen V lo suficientemente pequeña como para que presente un monodominio magnético, con una anisotropía en una dirección dada, k, entonces la energía para invertir la magnetización del monodominio es E = KV, con K la constante de anisotropía. Cuando la energía térmica k_BT es comparable con E, entonces es posible que ocurra la inversión de la magnetización del monodominio en la partícula sólo por efectos térmicos.

El tiempo de relajación τ necesario para que ocurra la reversión de manera espontánea debido a efectos térmicos viene dada por la llamada Ley de Arrhenius-Néel,

$$\tau(T) = \tau_0 e^{KV/K_B T},$$

donde τ_0^{-1} es del orden de 1 GHz. Un criterio para la determinar la temperatura crítica (llamada temperatura de bloqueo T_B) es

$$\frac{KV}{k_B T_B} \approx 25,$$

que se corresponde con un tiempo de 100 s, lo que es más que suficiente para realizar mediciones magnéticas. Si la temperatura es mayor a T_B , la partícula entera se comporta como un paramagneto pues su magnetización oscila más rápidamente que el tiempo de medición. Si la temperatura es menor que T_B , la oscilación de la magnetización debido a efectos térmicos será más lenta que el tiempo de medición, se podrá entonces medir una magnetización no nula, y se dice que la partícula está bloqueada. La tabla 1 muestra los tiempos de relajación para diferentes temperaturas y para distintos radios en partículas esféricas de cobalto.

La rápida disminución del tiempo de relajación con el tamaño ha motivado la búsqueda de nuevas tecnologías que permitan incrementar la anisotropía K, concentrando la atención de numerosos grupos de investigación en el mundo. Algunas propuestas consideran la variación de la forma de una partícula, para así generar una anisotropía de forma que ayude a estabilizar la magnetización [Milinska and Wawro, 2014, Telepinsky

Radio (mm)	Temperatura (K)	Tiempo de relajación
3.0	300	1.9 ms
3.5	260	332 s
3.5	300	10 s
3.5	340	0.6 s
3.5	380	76 ms
4.0	300	223 h
5.0	300	$\sim 10^{12}~{ m a}$

Tabla 1.1: Tiempo de relajación superparamagnética para partículas de cobalto [Coey, 2010].

et al., 2016]. Otra alternativa es utilizar multicapas de cobalto y paladio, lo que permite tener una alta anisotropía en la interface del cobalto perpendicular a esta, por lo que es ideal en medios de magnetización perpendicular [Durr et al., 1998].

Basados en esto, en el marco de esta tesis abordamos el problema de describir cualitativa y cuantitativamente las distintas configuraciones que adopta la magnetización en nanopartículas de diferente forma. Analizando el comportamiento de la magnetización frente a campos externos podemos establecer su potencial para futuras aplicaciones en las que se requiera el control de los mecanismos de reversión de la magnetización. Para partículas de tamaño nanométrico, como por ejemplo las partículas con forma de estadio y en los anillos pequeños que estudiamos en esta tesis, es posible estimar la temperatura de bloqueo T_B mediante curvas llamadas Zero Field Cooled (ZFC) y Field Cooled (FC), la que usualmente es menor a la temperatura de Curie y bastante mayor que la de ambiente.

Capítulo 2

Principios Fundamentales del Magnetismo

Un material magnético está formado por momentos magnéticos. Un momento magnético m puede ser un átomo, un ion, o un conjunto de átomos, que se comportan de la misma manera que un pequeño imán, es decir, presenta una respuesta a un campo magnético. Un momento magnético puede definirse como:

$$\mathbf{m} = \gamma \mathbf{J}; \quad \mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L},$$

donde γ es la razón giromagnética, J es el momento angular total, S es el momento angular de espín, y L es el momento angular orbital. En los metales de transición, el momento angular orbital es despreciable, y debido al solapamiento de sus orbitales 4s y 3d, los momentos magnéticos son valores no enteros, algunos de los cuales están dados en la tabla 2

Material	Fe	Ni	Со	Fe_3O_4	$Y_3Fe_5O_{12}$	$Dy_3Fe_5O_{12}$
$m \left[\mu_B \right]$	2.2	0.615	1.7	4.1	5.0	18.2

Tabla 2.1: Momento magnético *m* por átomo de diferentes materiales magnéticos.

Por el contrario, en las Tierras Raras la contribución principal al momento magnético total viene de los orbitales f, lo que hace que los imanes que generan campos más intensos son aquellos construidos a partir de estos materiales.

Si tenemos un material magnético que contiene N momentos magnéticos en un volumen V, su magnetización será

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_{i} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_{i} \delta(\mathbf{r}_{i}).$$

En ausencia de fuentes de carga eléctrica y densidad de corriente eléctrica, las ecuaciones que gobiernan el magnetismo estático son

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \times \mathbf{H} = 0,$$

donde ${\bf B}$ es el campo de inducción magnética, y ${\bf H}$ es el campo magnético. Notemos que ellos se relacionan a través de

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}).$$

Todos los materiales que existen presentan propiedades magnéticas y se clasifican según sea su respuesta frente a un campo magnético externo H. Estos materiales pueden ser diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos, ferrimagnéticos, etc. Para entender mejor esto, definimos la susceptibilidad χ del material como:

$$\chi = \frac{M_H}{H},$$

donde M_H es la componente de la magnetización en la dirección del campo magnético externo. Los materiales diamagnéticos son materiales que en respuesta de un campo magnético externo H pueden generar una magnetización que se opone a H. Estos materiales no tienen momentos magnéticos a campo H = 0, pero sus electrones pueden formar momentos magnéticos débiles al ser perturbados por un campo externo. En estos materiales la susceptibilidad es negativa, y es del orden de 10^{-6} . Ejemplos de materiales diamagnéticos son el agua, el bismuto, el hidrógeno y el cobre. Un material paramagnético es aquel cuya respuesta frente a un campo magnético externo es una magnetización en la dirección del campo. Los materiales paramagnéticos presentan momentos magnéticos a nivel atómico, pero por efectos térmicos, estos están orientados en cualquier dirección, razón por la cual a campo nulo, no presentan magnetización neta. Frente a un campo H de baja intensidad la magnetización presenta un comportamiento lineal, mientras que a campos mayores que un cierto valor, un material paramagnético se satura y muestra una respuesta constante a medida que el campo magnético crece. El aire y el aluminio son materiales paramagnéticos. La figura 2.1 muestra la respuesta de los materiales diamagnéticos y paramagnéticos frente a un campo magnético H.

La tabla 2 muestra la susceptibilidad por unidad de masa χ_m para distintos materiales:

Material	MgO	AI_2O_3		H_2O	TiO ₂	Al	Sc	Pd
$\chi_m~(10^{-9}~{ m m^3/kg})$	-3.1	-4.8	-2.7	-9.0	0.9	7.9	88.0	67.0

Tabla 2.2: Susceptibilidades por unidad de masa χ_m de algunos materiales paramagnéticos y diamagnéticos.



Figura 2.1: Comportamiento de la magnetización en función del campo magnético externo en materiales diamagnéticos (azul) y paramagnéticos (rojo).

Existen además materiales en los que sus momentos magnéticos presentan un cierto orden, aún a campo magnético externo H = 0. Estos materiales, conocidos como ferromagnéticos, presentan una magnetización M espontánea a campo magnético externo nulo. Este orden se pierde a temperaturas altas, superiores a una cierta temperatura crítica llamada temperatura de Curie, sobre la cual el material ferromagnético se transforma en un material paramagnético. Esto se debe a que en los materiales ferromagnéticos los momentos magnéticos vecinos son fuertemente interactuantes, y bajan su energía alineándose en la misma dirección. Una característica importante de un material ferromagnético es que al medir un ciclo de magnetización en función de campo magnético externo, la magnetización que tiene el material depende del camino que se ha seguido hasta llegar a cada valor de campo. Si llamamos h a la dirección del campo magnético aplicado (i.e. |h| = 1), entonces, llamaremos curva de histéresis de un material ferromagnético con campo de saturación H_S a la curva $M_H = M_H(H)$, con H es el modulo del campo externo en la dirección h que comienza en $\mathbf{H} = H_S \mathbf{h}$ y decrece hasta $\mathbf{H} = -H_S \mathbf{h}$. Luego el campo se incrementa en pequeños pasos de campo hasta volver a $\mathbf{H} = H_s \mathbf{h}$. $M_H = \mathbf{M} \cdot \mathbf{h} / M_S$ es la componente de la magnetización en la dirección del campo aplicado, con M_S la magnetización de saturación, que corresponde a la magnetización que presenta el material magnético saturado. Es importante que el campo H_S , llamado campo de saturación sea lo suficientemente intenso como para saturar los momentos magnéticos en la dirección de h.

En una curva de histéresis, existen algunos campos y magnetizaciones que son de especial interés. La magnetización remanente es la magnetización M_H en la que H = 0, y lo representaremos por M_R . El campo de coercitividad es aquel en que $M_H = 0$, y lo escribiremos como H_C . Este campo es muy importante en un material, pues en las memorias y discos duros es importante que la magnetización no se invierta para campos magnéticos débiles, pues en un circuito siempre habrán campos magnéticos débiles, por lo que un material para estos fines debe tener un alto campo de coercitividad. Estos puntos se pueden observar en la figura 2.2.



Figura 2.2: Curva de histéresis de un material ferromagnético.

Si se deja un material ferromagnético a campo cero con una magnetización remanente un tiempo lo suficientemente largo, entonces los momentos magnéticos del material comenzarán a reordenarse en pequeñas regiones en las cuales la magnetización está saturada, pero apuntando en direcciones diferentes. A estas regiones las denominamos dominios magnéticos. Para disminuir la energía entre momentos magnéticos vecinos en regiones con diferente dirección de la magnetización, se genera una región intermedia que llamamos pared de dominio (Ver figura 1.1).

Existen también materiales que no presentan magnetización a campo magnético externo $\mathbf{H} = 0$, pero que mantienen un ordenamiento que puede evidenciarse si cortamos el material en determinadas capas. Estos materiales son denominados antiferromagnéticos y pueden visualizarse como si estuvieran formados por dos subredes ferromagnéticas, cada una con la magnetización apuntando en direcciones opuestas de igual magnitud. Al igual que en los materiales ferromagnéticos, este orden se pierde al aumentar la temperatura. Sobre una cierta temperatura T_N , llamada temperatura de Néel, un material antiferromagnético se transforma en un material paramagnético.

Si la magnitud de los momentos en cada subred es diferente, entonces a campo magnético externo H = 0 habrá una magnetización remanente pequeña. Estos materiales se conocen como ferrimagnetos.

2.1. Energías involucradas

Como vimos en la sección anterior, un material magnético esta formado por N momentos magnéticos \mathbf{m}_i . La energía de este material magnético es

$$\mathcal{E} = -\sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{eff}},$$

donde $\mathbf{H}_{i}^{\text{eff}}$ es el campo efectivo que actúa sobre el *i*-esimo momento magnético. Este campo contiene diferentes contribuciones, tales como el campo dipolar $\mathbf{H}_{i}^{\text{dip}}$, el campo de intercambio $\mathbf{H}_{i}^{\text{int}}$, el campo anisotrópico $\mathbf{H}_{i}^{\text{an}}$, y el campo magnético aplicado \mathbf{H}_{a} , entre otras. Es decir

$$\mathbf{H}_{i}^{ ext{eff}} = \mathbf{H}_{i}^{ ext{int}} + \mathbf{H}_{i}^{ ext{dip}} + \mathbf{H}_{i}^{ ext{an}} + \mathbf{H}_{a} + \dots$$

El sistema magnético se entiende inmerso en un baño térmico de temperatura T, por lo que los efectos térmicos son del orden $k_B T$, donde k_B es la constante de Boltzmann, y tiene un valor de $8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/K.

2.1.1. Energía de Zeeman

La energía de Zeeman proviene de la interacción de los momentos magnéticos con un campo magnético externo. Esta energía se puede entender como un trabajo realizado sobre el material magnético por el campo y se denota

$$\mathcal{E}_{\text{zee}} = -\sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}_a,$$
 (2.1)

para minimizar esta energía, el sistema tendera a alinearse con el campo H_a .

2.1.2. Energía de Intercambio

La energía de intercambio, también llamada energía de exchange, es debida a la interacción de intercambio entre momentos magnéticos cercanos. Para minimizar esta energía el sistema alinea localmente los momentos magnéticos vecinos paralelos (o antiparalelos), si se trata de un material ferromagnético (o antiferromagnético).

La forma de esta energía es

$$\mathcal{E}_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^{N} J_{ik} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k,$$

donde J_{ik} es una constante, llamada constante de intercambio. Esta constante es función de $\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i$. En los materiales isotrópicos, esta constante depende de la distancia entre los momentos $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i|$, y disminuye rápidamente al aumentar la distancia, por lo que sólo es apreciable si el momento *i* y *k* son primeros vecinos. Bajo estas condiciones diremos que J_{ik} es una constante igual a *J*, con lo que

$$\mathcal{E}_{int} = -J \sum_{\langle i,k \rangle}^{N} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k, \qquad (2.2)$$

donde $\langle i, k \rangle$ denota momentos magnéticos primeros vecinos. Es por esto que se dice que la interacción de intercambio es una interacción local y el campo $\mathbf{H}_{i}^{\text{int}}$ está dado por

$$\mathbf{H}_i^{\text{int}} = J \sum_{\langle i,k \rangle} \mathbf{m}_k.$$

Dado el pequeño rango en que esta interacción es no nula, se dice que es de corto alcance. Es importante observar que un material ferromagnético se obtiene cuando J > 0, mientras que uno antiferromagnético se genera si J < 0, como se observa en la figura 2.3. Esta constante depende también de la temperatura, por lo que a alta temperatura J se anula y tenemos un material paramagnético. La temperatura de transición entre las fases ferromagnéticas y paramagnéticas es la temperatura de Curie T_C y depende del material.

2.1.3. Energía Dipolar

La energía dipolar es aquella que se debe a la interacción dipolar entre los momentos magnéticos. La forma de la energía dipolar es

$$\mathcal{E}_{dip} = \gamma_D \sum_{i \neq k}^{N} \frac{\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k - 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n}_{ik})(\mathbf{m}_k \cdot \mathbf{n}_{ik})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|^3},$$
(2.3)

donde $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|$ es la distancia entre los momentos magnéticos *i* y *k* y la suma corre sobre cualquier par de momentos magnéticos del sistema. La constante γ_D nos permite obtener



Figura 2.3: Representación esquemática del ordenamiento magnético relativo entre momentos magnéticos vecinos en un ferromagneto (a) y un antiferromagneto (b).

las dimensiones correctas de energía. Esta es una interacción de largo alcance, porque aunque dos momentos magnéticos estén bien alejados, la interacción no es nula. De esta forma el campo dipolar viene dado por

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{dip}} = -\gamma_{D} \sum_{i \neq k} \frac{\mathbf{m}_{k} - 3(\mathbf{m}_{k} \cdot \mathbf{n}_{ik})\mathbf{n}_{ik}}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{k}|^{3}}.$$

Otra propiedad importante es que la energía dipolar define direcciones preferentes de la magnetización, lo que llamamos anisotropía de forma. Por ejemplo, en un hilo largo, la energía dipolar hará que los momentos del hilo se alinien en la dirección del eje del hilo.

Las líneas del campo dipolar producido por un momento magnético están dadas en la figura 2.4.

2.1.4. Energía de Anisotropía

Las energías de anisotropía son aquellas que definen direcciones preferentes para la magnetización y son inducidas por la forma de un sistema, las direcciones preferentes de los orbitales de los átomos magnéticos, efectos de las superficies, y otros. La anisotropía cristalina, por ejemplo, se debe a las direcciones preferentes de los orbitales, que hacen que la probabilidad de encontrar electrones a cierta distancia del núcleo no sea isotrópica. En este grupo tenemos dos anisotropías muy importantes: la uniaxial y la



Figura 2.4: Líneas de campo generadas por un momento dipolar. En la figura, vemos como las líneas de campo se cierran.

cúbica. La anisotropía uniaxial es aquella en la cual existe una dirección preferente de la magnetización, y suele presentarse en materiales que cristalizan en una red hcp (hexagonal close packed), tales como el cobalto. Esta anisotropía se caracteriza por escoger una dirección de preferencia para los momentos magnéticos, dejando libre el sentido en que estos se orientan en esa dirección.

Si llamamos n a la dirección de preferencia, entonces la energía de anisotropía tendrá la forma

$$\mathcal{E}_{\mathbf{u}} = \sum_{i=1}^{N} K_i^{(1)} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n})^2 + \sum_{i=1}^{N} K_i^{(2)} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n})^4 + \dots,$$

donde hemos escogido solo las potencias pares de $\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n}$ pues es necesario que tanto \mathbf{m} como $-\mathbf{m}$ tengan la misma energía. A primer orden en un material podemos hacer $K_i^{(1)} = -K$, por lo que

$$\mathcal{E}_{\mathbf{u}} = -K \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n})^2.$$
(2.4)

Esta forma de anisotropía en realidad permite dos estados posibles. Si K < 0 el sistema prefiere no estar alineado a lo largo de una dirección preferente, en cuyo caso decimos que la magnetización estará en el plano perpendicular a la dirección elegida, mientras que si K > 0, entonces, \mathbf{m}_i será paralelo a $\pm \mathbf{n}$.

Existe también una anisotropía cúbica, que se genera en redes cúbicas tales como la red bcc o la fcc, en las cuales el sistema elige como preferente cualquiera de las tres

direcciones cristalográficas. En este caso la energía puede escribirse como

$$\mathcal{E}_{c} = K \sum_{i=1}^{N} (m_{xi}m_{yi} + m_{yi}m_{zi} + m_{zi}m_{xi}).$$

Si K > 0, la dirección de mínima energía es la [100], mientras que la de mayor energía será la [111]. Esto ocurre por ejemplo en el hierro. También existen materiales con K < 0 como el niquel, en el cual la dirección preferente es la [111].

Sin embargo no todos los sistemas muestran una anisotropía cristalina neta, pues hay materiales que están formados por diversos granos cuyas orientaciones cristalinas varían de grano en grano y, por consiguiente, muestran una anisotropía promedio nula.

Otro tipo de anisotropía proviene de la superficie del material magnético, y puede escribirse como

$$\mathcal{E}_{\rm s} = -K_s (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_S)^2,$$

donde n_S es un vector perpendicular a la superficie que indica la dirección de preferencia de la magnetización, de manera similar a la anisotropía uniaxial, con la salvedad que n_S es un vector que cambia a medida que nos movemos en la superficie del material ferromagnético.

Los campos efectivos producidos por las anisotropias son diferentes a los producidos por la interacción de intercambio o la interacción dipolar, pues el campo efectivo depende sólo de cada momento magnético y no de la interacción entre un par de estos. Es así como

$$\mathbf{H}_{i}^{\mathrm{u}} = K(\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}; \quad \mathbf{H}_{i}^{\mathrm{c}} = -K\mathbf{m}_{i}^{*}; \quad \mathbf{H}_{i}^{\mathrm{s}} = K_{S}(\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{n}_{S})\mathbf{n}_{S},$$

donde $\mathbf{m}_i^* = m_{yi}\mathbf{x} + m_{zi}\mathbf{y} + m_{zi}\mathbf{z}$.

2.2. Configuraciones de la magnetización

Si tenemos un material ferromagnético y lo dejamos relajar durante un tiempo lo suficientemente largo, el material se desmagnetizará. Sin embargo, este es un efecto global del material ferromagnético, pues localmente hay regiones en donde la magnetización apunta en una misma dirección, pero la suma vectorial de las magnetizaciones de todas estas regiones es cero. A estas regiones las denominamos *dominios magnéticos*.

2.2.1. Paredes de dominios

Consideremos un material ferromagnético cuyos momentos magnéticos apuntan en una misma dirección, esto es, un monodominio. Luego de un tiempo, para minimizar su energía, se formarán varios dominios, como muestra la figura 2.5:



Figura 2.5: Formación de de dos dominios a partir de un monodominio, minimizando la energía dipolar.

La región que separa los dos dominios se llama *pared de dominio* (*domain wall*), y su tamaño depende de los parámetros magnéticos y geométricos del material. Si tomamos un material ferromagnético de volumen V, existe un volumen límite para el cual no se formarán dominios. Esto es, cuando sus dimensiones son del orden de la *longitud de intercambio*, magnitud que depende del material y esta dada por

$$\lambda_{\rm exc} = \sqrt{\frac{2A_{\rm stiff}}{\mu_0 M_s^2}},$$

donde $A_{\rm stiff}$ es la constante de Stiffness propia de cada material, y M_s es la magnetización de saturación. La constante $\mu_0=4\pi\cdot 10^{-7}$ Tm/A es la llamada permeabilidad magnética del vacío.

En general, una pared recibe una nominación acorde al ángulo en que rota la magnetización a lo largo de la pared. La figura 2.6 muestra algunos dominios magnéticos separados por paredes de dominios de tipo $\pi/2$ y π .

También las paredes son denominadas acorde a la dirección en que se produce la rotación de los momentos magnéticos en su interior. En las paredes de Bloch los momentos magnéticos cambian su dirección saliendo del plano de la magnetización de los dominios, y en las paredes de Néel los momentos magnéticos giran en el mismo plano de la magnetización de los dominios. La rotación de los momentos magnéticos ocurre de tal



Figura 2.6: Multidominios en un material ferromagnético. En la figura podemos ver diferentes tipos de pared de dominios, una pared de dominio de tipo $\pi/2$ encerrada en un círculo azul, y una pared de dominio de tipo π , encerrada en un círculo rojo.

forma que minimice la energía de la pared, con lo que el ancho de la pared queda definido por $\delta = \pi \sqrt{A/K}$ y su energía por unidad de longitud es $\gamma = \sqrt{AK}$. Por lo general, el ancho de la pared varía entre 10 nm y 100 nm, mientras que la energía asociada a la pared es del orden de 1 mJ m⁻².



Figura 2.7: Configuración de la magnetización en (a) una pared de Bloch y (b) una pared de Néel. Esta imagen fue tomada de la referencia [Coey, 2010].

Material	$Ni_{80}Fe_{20}$	Fe	Со	$SmCo_5$
M_s (MA m $^{-1}$)	0.84	1.71	1.44	0.86
$A (pJ m^{-1})$	10	21	31	12
K (kJ m $^{-3}$)	0.15	48	410	17200
δ nm	2000	64	24	2.6
γ (mJ m $^{-2}$)	0.01	4.1	14.3	57.5
$\lambda_{ m exc}$ nm	3.4	2.4	3.4	3.6

La tabla 2.2.1 entrega algunos parámetros asociados a paredes de dominio de diferentes materiales.

Tabla 2.3: Parámetros de los dominios magnéticos para algunos materiales ferromagnéticos [Coey, 2010].

2.2.2. Vórtices y antivórtices

Uno de los estados de la magnetización más estudiados en geometrías cilíndricas, y en muchas otras, son los vórtices. Un vórtice es una configuración en la que los dominios magnéticos se cierran, como se observa en la figura 2.8.



Figura 2.8: Configuración de los momentos magnéticos en un estado vórtice. En azul se aprecia la zona exterior en la que los momentos magnéticos circulan alrededor de la región central o core, cuya componente mayoritaria de la magnetización apunta fuera del plano.

En la figura se observa una región exterior en la que los momentos magnéticos se orientan circulando alrededor de la estructura, disminuyendo así la energía dipolar, y una región central en la que los momentos magnéticos salen del plano. El comportamiento de la magnetización en ambas regiones define dos características del vórtice, la polaridad, definida por el sentido de la magnetización en la región central, mientras que al sentido de giro define la quiralidad del vórtice, como se observa en la figura 2.8.

Las propiedades topológicas de un vórtice vienen dadas por su quilaridad y polaridad. Las figuras 2.9(a) y 2.9(b) muestran la quiralidad en sentido de las agujas del reloj, mientras que las figuras 2.9(c) y 2.9(d) muestran una quiralidad en sentido opuesto. Las figuras 2.9(a) y 2.9(c) muestran una polaridad que denominamos up, mientras que las figuras 2.9(b) y 2.9(d) muestran una polaridad que llamamos down.



Figura 2.9: Quiralidad y polaridad en un vórtice. (a) muestra un vórtice con quilaridad en sentido de las agujas del reloj, y polaridad up, a diferencia de la figura en (b) que tiene polaridad down. (*c*) muestra un vórtice con quilaridad en sentido contrario de las agujas del reloj, y polaridad up, a diferencia de (d) que tiene polaridad down.

Otra configuración de la magnetización que aparece con cierta frecuencia en estructuras magnéticas son los antivórtices. Estas son estructuras que pueden aparecer debido a la geometría del sistema [Drews et al., 2009, Gliga et al., 2008], o debido a la existencia de vórtices de igual quilaridad, lo que deja una región central con un antivórtice [Gaididei et al., 2012]. La configuración que adoptan los momentos magnéticos en un antivórtice se muestra en la figura 2.10

En los antivórtices, al igual que en los vórtices, podemos definir una polaridad, dada por la dirección de la magnetización en la región central.



Figura 2.10: Configuración de los momentos magnéticos en un estado antivórtice. El tamaño de las flechas en color azul indica la magnitud de la componente en el plano de la magnetización.

2.3. Simulaciones Numéricas

Si consideramos un material magnético constituido por N momentos magnéticos \mathbf{m}_i , entonces, minimizar analíticamente la energía consiste en resolver 3N ecuaciones acopladas, lo que es un trabajo irrealizable, aún cuando tengamos sistemas de tamaño nanométrico. En este punto se hace necesario utilizar algún método numérico que nos permita explorar el espacio de configuraciones de una manera eficiente. El método numérico que usaremos es el método de Monte Carlo, el cual es un método no determinista que nos permite obtener configuraciones magnéticas que minimicen la energía. Para nuestros cálculos usaremos el siguiente algoritmo:

- 1. Para un cierto valor de campo definimos una posible configuración magnética inicial, que puede ser aleatoria, $\{\mathbf{m}_i\}_{old}$, y calculamos su energía \mathcal{E}_{old} .
- 2. Escogemos un momento magnético de manera aleatorio, y lo reorientamos de manera aleatoria.
- 3. Calculamos la energía \mathcal{E}_{new} de esta nueva configuración de la magnetización $\{\mathbf{m}_i\}_{new}$.
- 4. Calculamos $\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E}_{new} \mathcal{E}_{old}$. Si $\Delta \mathcal{E} < 0$ aceptamos la nueva configuración de la magnetización de la partícula *i*, hacemos $\{\mathbf{m}_i\}_{old} = \{\mathbf{m}_i\}_{new}$, y repetimos el algoritmo comenzando en el paso 2. Si $\Delta \mathcal{E} > 0$, utilizamos el algoritmo de Metropolis [Binder and Heermann, 2002] con probabilidad $\min(1, e^{-\Delta \mathcal{E}/k_B T})$ y calculamos un número aleatorio ξ . Si $\xi > e^{-\Delta \mathcal{E}/k_B T}$, no aceptamos la nueva configuración de la partícula *i*, y repetimos el algoritmo comenzando en el paso 2. Si $\xi < e^{-\Delta \mathcal{E}/k_B T}$, aceptamos la nueva configuración de la partícula *i*, repetimos el algoritmo comenzando en el paso 2. Si $\xi < e^{-\Delta \mathcal{E}/k_B T}$, aceptamos la nueva configuración de la magnetización, es decir, hacemos $\{\mathbf{m}_i\}_{old} = \{\mathbf{m}_i\}_{new}$, y repetimos el algoritmo comenzando en el paso 2.

Dependiendo del cálculo en particular que deseamos hacer, para cada valor de campo magnético que nos interese, ejecutamos el algoritmo anterior $MCS \cdot N$ veces, siendo MCS el número de pasos de Monte Carlo, un parámetro de la simulación. Por ejemplo, si deseamos simular un proceso de relajación de la magnetización, comenzando de una determinada configuración magnética, aplicamos el algoritmo de Monte Carlo $MCS \cdot N$ veces, con un MCS alto. Si deseamos realizar un ciclo de histéresis, en cada paso de campo aplicamos el algoritmo de Monte Carlo $MCS \cdot N$ veces, donde el parámetro MCS se escoge de manera de asegurar la convergencia del campo de coercitividad. La última configuración magnética obtenida para cada valor de campo, será una de las posibles configuración magnética físicamente aceptables para las condiciones definidas de campo y temperatura.

El parámetro MCS nos da una medida de cuantos estados posibles pueden ser testeados por el sistema, es decir, a mayor MCS un material magnético podrá testear un mayor número de configuraciones, permitiéndonos mejores resultados. Sin embargo, es un parámetro crítico, pues si MCS es demasiado alto, es posible obtener una configuración que no sea la experimentalmente alcanzable, particularmente en un experimento rápido, como es una curva de histéresis con la técnica de Mössbauer. También un número MCSmuy alto requiere de una capacidad de cálculo y tiempo muy extendido.

El Método de Monte Carlo, como vimos previamente, es ideal para obtener ciclos de histéresis, en los cuales la magnetización en un cierto instante depende de la magnetización en el instante anterior. La memoria del método solo considera la configuración anterior para construir la nueva configuración.

El tratamiento estadístico requiere realizar muchas simulaciones, con diferentes secuencias de números aleatorios, obteniendo el promedio como resultado físico válido. En este promedio, las pequeñas variaciones en la curva de histéresis, son eliminadas. Sin embargo, en este proceso es posible encontrar más de un modo de reversión de la magnetización, lo que implica que existen geometrías (considerando sus dimensiones) en las cuales puede coexistir más de un modo. En estos casos, es posible calcular las probabilidades de ocurrencia de estos modos de reversión, probabilidad que depende de cada tamaño específico considerado.

2.3.1. Efectos de la temperatura

Consideramos para todos los efectos un ensamble canónico en el cual no hay intercambio de partículas, pero si hay intercambio de energía a través del campo externo H, que hace un trabajo $\sum_{i} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{H}$ sobre el volumen magnético. Entonces, consideramos que el volumen magnético está inmerso en un baño térmico a temperatura T. Esto aporta una fluctuación de energía del orden de $k_{B}T$, lo que permite alcanzar ciertos estados de mayor energía. Esto genera una cierta aleatoriedad en los sistemas, la que se refleja en la formación de distintas configuraciones en ciertos rangos de energía. Los modos de reversión de la magnetización son especialmente sensibles a los parámetros geométricos y a los procesos estocásticos provocados por la temperatura. Así a mayor temperatura, hay un mayor número de estados magnéticos posibles, lo que conlleva que para un mismo volumen magnético podamos tener más de una posible configuración de la magnetización. En este punto es crucial la energía térmica, pues si T = 0, los sistemas se podrían quedar atrapados en mínimos locales de energía, y posiblemente nunca alcanzarían mínimos globales, como se requiere en el caso de las relajaciones, por ejemplo.

2.4. Método de Escalamiento

Si consideramos un material magnético de tamaño nanométrico de volumen V, entonces, el número de partículas en el material es nV, donde n es el número de momentos magnéticos por nanómetro cúbico. Por ejemplo, para el hierro bcc, tenemos que $n = 0.911 \cdot 10^2$ momentos/nm³. Si tenemos un hilo, por ejemplo, de largo L = 100 nm y radio R = 20 nm, el volumen del hilo es $V = 1.26 \cdot 10^5$ nm³, y el número de partículas es $N = 1.145 \cdot 10^7$, número extremadamente alto si uno desea calcular las energía del sistema. Computacionalmente, realizar cálculos con este número de momentos es inviable, por lo que se debe buscar alguna forma de reducir los tiempos de simulación.

Al respecto, el año 2002, J. d'Albuquerque e Castro *et al.* [d'Albuquerque e Castro et al., 2002] desarrollaron el método de escalamiento, el cual consiste en escalar las dimensiones del sistema, obteniendo uno de menor tamaño que se comporte de la misma forma que el sistema original. Esto afecta de manera directa a la energía dipolar, ya que es una interacción de largo alcance. Dado que esta energía disminuye con el tamaño del sistema, debemos escalar también la energía de intercambio, para así obtener los mismos estados en el sistema escalado que en el sistema sin escalar. Los autores proponen escalar la energía de intercambio como $\mathcal{E}'_{int} = x \mathcal{E}_{int}$ o, en forma equivalente, escalar la energía de intercambio como:

$$J' = xJ$$

Donde x es llamada constante de escalamiento y es un número menor que 1. En estas condiciones, las dimensiones del sistema se escalan como

$$(\operatorname{dimensión})' = x^{\eta}(\operatorname{dimensión})$$

El escalamiento de las energías implica que debería escalarse también la energía térmica, es decir, deberíamos también escalar la temperatura. Se han propuesto dos hipótesis acerca de como escalar la temperatura, utilizando dos propiedades de la temperatura. La primera dice que la constante de intercambio es linealmente proporcional a la temperatura de Curie del material ferromagnético, por lo tanto, T escala como J, esto es, T' = xT. La otra hipótesis, usa la temperatura de bloqueo, que es proporcional a V, lo que implica que T escala como V, es decir, como $T' = x^{3\eta}T$. En nuestros cálculos, usaremos la segunda hipótesis. De esta forma, al disminuir el número de partículas se reduce considerablemente el tiempo de simulación.

Utilizando esta técnica, J. d'Albuquerque e Castro *et al.* [d'Albuquerque e Castro et al., 2002] realizaron diagramas de fase para hilos magnéticos, los que son mostrados en la figura 2.11. En ellos encontraron que el parámetro de escalamiento η debe tener un valor entre 0.55 y 0.56.



Figura 2.11: Técnica del escalamiento, donde se aprecia como es posible escalar el sistema, obteniendo diferentes diagramas de fase, que al reescalar, todos convergen en el diagrama de fases a tamaño real.

Capítulo 3

Mecánismos de reversión en partículas con forma de estadio

3.1. Introducción

Como ya ha sido comentado en esta tesis, los arreglos de partículas cilíndricas magnéticas han sido extensamente investigados durante los últimos años. Tales estructuras pueden ser diseñadas para mostrar diferentes estados estables de la magnetización, dependiendo de sus parámetros geométricos. Así mismo, una partícula puede exhibir diferentes mecanismos de reversión de su magnetización, acorde a sus dimensiones y formas. En particular, y de acuerdo a las características del sistema, la reversión de la magnetización puede ocurrir mediante la nucleación y propagación de paredes de dominio a lo largo de una estructura, o también generando vórtices y antivórtices, entre otros mecanismos. La creación y aniquilación de vórtices magnéticos es un mecanismo que ha sido evidenciado en una amplia variedad de estructuras, tales como dots, elipses, estructuras rectangulares, entre otras [Shinjo et al., 2000, Wachowiak et al., 2002, García-Martín et al., 2004]. Los vórtices se caracterizan por poseer componentes de la magnetización orientadas a lo largo de diferentes direcciones. Por ejemplo, si consideramos un disco cuya magnetización está descrita por un vórtice, en la región central del disco tendremos momentos magnéticos apuntando fuera del plano de la magnetización, definiendo la región conocida como core. La magnetización en esta región puede apuntar hacia arriba o hacia abajo, lo que define la polaridad del vórtice, como muestra la figura 2.9.

Un estudio sistemático mediante microscopia de fuerza magnética reveló la existencia de vórtices en discos de permalloy (Ni₈₀Fe₂₀) de un diámetro aproximado a 1 μ m [Shinjo et al., 2000]. Desde entonces muchos han sido los estudios que han abordado los vórtices magnéticos [Wachowiak et al., 2002, García-Martín et al., 2004], sus propiedades dinámicas [Compton and Crowell, 2006, Buchanan et al., 2005, Buchanan et al., 2006, Chou et al., 2007], y el control de su polaridad [Choe et al., 2004, Waeyenberge et al.,

2006, Kammerer et al., 2011] y quilaridad [Wachowiak et al., 2002, Kimura et al., 2005]. Al estudiar partículas con geometría elíptica, existe evidencia de que la reversión puede ser conducida por medio de la nucleación de uno o más vórtices como función del tamaño, de forma que estos sistemas ofrecen la posibilidad de investigar un sólo vórtice o dos vórtices interactuantes [Vavassori et al., 2004, Buchanan et al., 2005, Buchanan et al., 2006].

A pesar de que las partículas con forma de estadio son similares a las elipses, las primeras han sido escasamente estudiadas [Eames, 2004, Dahlberg, 2011]. Las partículas con forma de estadio se caracterizan por poseer una región central de largo S y dos semicírculos planos de radio R, como mostramos en la figura 3.1. Los resultados experimentales en partículas de cientos de nanómetros de longitud mostraron que para estadios con una relación de aspecto (longitud/ancho) pequeña, la reversión de la magnetización ocurre mediante la nucleación y propagación de un único vórtice. Sin embargo, en estadios con una relación de aspecto mayor, se ha evidenciado la creación y aniquilación de un par de vórtice-antivórtice, de gran importancia durante el proceso de reversión [Eames, 2004, Dahlberg, 2011].



Figura 3.1: Parámetros geométricos de un estadio. También representamos el sistema de coordenadas x y y, y el campo aplicado en la dirección x.

En el trabajo presentado a continuación utilizamos simulaciones de Monte Carlo para estudiar los modos de reversión de partículas con forma de estadio en función del tamaño de la región central de longitud *S*. Nuestros resultados evidencian la existencia de diferentes modos de reversión, e incluso la coexistencia de algunos de ellos para geometrías particulares.

3.2. Modelo

Comenzamos nuestro estudio definiendo una partícula con forma de estadio, uniforme y aislada, formada por dos semicírculos planos de radio R = 40 nm, una parte central de longitud S que varía entre 0 y 200 nm en pasos de 10 nm y un espesor h = 20nm. Si aplicamos a nuestro sistema un campo externo H a lo largo de la longitud de la estructura del estadio, la energía, \mathcal{E} , posee tres contribuciones: los términos de intercambio, de Zeeman y dipolar, discutidas en las ecuaciones 2.1, 2.2 y 2.3 respectivamente y definidas en el Capítulo 2. Como estamos interesados en muestras policristalinas, no hemos incluido anisotropía. Asi, la energía de esta partícula está dada por

$$\mathcal{E} = -J \sum_{\langle i,k \rangle}^{N} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{k} + \gamma_{D} \sum_{i \neq k}^{N} \frac{\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{k} - 3(\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{n}_{ik})(\mathbf{m}_{k} \cdot \mathbf{n}_{ik})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{k}|^{3}} - \sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{H}_{a}.$$

Consideraremos partículas con geometría de estadio formadas por átomos de hierro en una red bcc de constante de red $a_0 = 0.28$ nm. Para nuestras simulaciones consideramos los mismos parámetros usados en trabajos previos sobre discos simétricos de Fe, en los cuales se obtuvo un buen acuerdo con mediciones experimentales. Esto es, un momento magnético $m = 2.2\mu_B$, con μ_B el magnetón de Bohr, y una constante de intercambio J = 40 meV [Mejía-López et al., 2006, Mejía-López et al., 2010]. Para las partículas consideradas en este trabajo, el número de átomos, N, es del orden de 10^8 , suficientemente grande para no permitir un cálculo discreto que considere cada momento magnético. Por ello reemplazamos nuestros sistemas por partículas equivalentes más pequeñas, definidas mediante la técnica de escalamiento que se ha descrito anteriormente [d'Albuquerque e Castro et al., 2002, Vargas et al., 2006, Mejía-López et al., 2005]. De esta forma escalamos la interacción de intercambio por un factor x = J'/J = 0.00245, es decir, reemplazamos J con J' = 0.098 meV en la expresión de la energía total. En este caso usamos $\eta \approx 0.56$ y el diámetro escalado $d' = dx^{\eta} = 2.68$ nm.

Las simulaciones de Monte Carlo se efectúan utilizando el algoritmo de Metropolis con dinámica local y el método de spin flip. Para nuestras simulaciones usamos T = 10 K [Mejía-López et al., 2005]. Cada simulación se inicia con el sistema saturado bajo un campo externo H = 5.0 kOe aplicado a lo largo de la dirección cristalográfica [100], etiquetada como el eje x. Esto genera una configuración inicial en que la mayoría de los momentos magnéticos apuntan lo largo de esta dirección. Luego el campo se disminuye en pasos de $\Delta H = 0.01$ kOe hasta -5.0 kOe, aumentandolo luego hasta 5.0 kOe, de forma que se utilizan 2003 valores de campo para completar el ciclo de histéresis.

Por otro lado, y debido a la situación de no equilibrio de las simulaciones de Monte Carlo, el número de pasos de Monte Carlo (MCS) en un aspecto crítico en el cálculo de las curvas de histéresis. Para clarificar este tema estudiamos inicialmente el efecto de

variar el número de MCS en la curva de histéresis, y una vez encontramos un número de MCS que no modifica la coercitividad, fijamos este número para todas las simulaciones de este estudio. En este caso se consideraron 7000 MCS para cada valor de campo. Para evidenciar la posible coexistencia de diferentes modos de reversión, se realizaron 10 simulaciones iniciadas con diferentes semillas para cada sistema estudiado.

3.3. Resultados

Una vez definido totalmente el procedimiento a seguir en cada sistema, abordamos estructuras tipo estadio definidas por S variando entre 0 y 200 nm. En nuestras simulaciones se observa que en todos los sistemas estudiados, la reversión se produce por medio de la nucleación y propagación de vórtices. Sin embargo, en función de S, podemos identificar tres modos de reversión diferentes, que nombraremos usando dos criterios:

- El número de vórtices presentes. Si la reversión es conducida por la nucleación y propagación de un único vórtice, nombraremos el modo como V. Si tenemos dos vórtices, nombramos el modo usando el segundo criterio, de acuerdo con el lugar en que estos nuclean.
- 2. Si ambos nuclean en el mismo lado, que puede ser +y o -y (ver figura 3.1), llamamos a este modo VAV. Si uno nuclea en la región +y y otro en la región -y, llamamos este modo VV.

Dependiendo de la geometría del estadio, esto es, del valor de S, observamos cuatro comportamientos diferentes del proceso de reversión. Para $0 \le S \le 90$ nm (región 1), la reversión de la magnetización es conducida por la nucleación de un único vórtice, que se propaga en la dirección perpendicular al campo externo. Este comportamiento se representa en la figura 3.2.



Figura 3.2: Instantáneas del proceso de reversión de un estadio con S = 80 nm para diferentes valores de campo. La reversión se inicia con el sistema prácticamente saturado en la dirección del eje x, como se representa en (a). Los momentos magnéticos en verde y amarillo poseen componente relevante de su magnetización a lo largo de la dirección +z (-z), formando el core del vórtice. Los momentos magnéticos en rojo están en el plano x - y. En este caso observamos un único vórtice y denotamos este modo como V.

Un comportamiento diferente se evidencia para $90 < S \le 140$ nm. Para estos tamaños observamos en algunas simulaciones la nucleación y propagación de un único vórtice (similar a lo que ocurre en la figura 3.2) pero en otras se muestra la nucleación de dos vórtices con diferentes quiralidades (ver figura 3.3).

La nucleación comienza en secciones opuestas del estadio, las denotadas como A y B en la figura 3.4, con los momentos magnéticos que inician la reversión orientando sus momentos magnéticos en A y B en la misma dirección.



Figura 3.3: Instantáneas del proceso de reversión para un estadio con S = 100 nm para diferentes valores de campo. La reversión se inicia con el sistema saturado frente a un campo a lo largo del eje x, como se representa en (a). Los momentos magnéticos del core, en color verde y amarillo (azul y morado) apuntan a lo largo de la dirección +z (-z). Los momentos magnéticos en rojo están en el plano x - y. Se evidencian claramente dos vórtices con diferentes quiralidades. Este modo lo llamamos VV.



Figura 3.4: Representación de los puntos *A* y *B* en un estadio.

Debido a ello se generan dos vórtices con diferentes quiralidades en regiones opuestas, creando un ordenamiento tipo diamante en el centro de la partícula, es decir, una región en

3.3. Resultados

la cual todos los momentos magnéticos apuntan en la misma dirección. Esta configuración fue observada previamente por Hankemeier *et al.* en rectángulos de Permalloy a través de microscopía de barrido electrónico con análisis de polarización [Hankemeier et al., 2009]. En sistemas con S < 90 nm, este tipo de reversión no puede ocurrir debido a que la existencia de dos vórtices vecinos con diferente quiralidad aumenta la energía dipolar en comparación con una configuración en la cual momentos magnéticos en A and B apuntan en direcciones opuestas. Pero para estructuras suficientemente largas el aumento en energía dipolar es pequeño y puede ser compensado con la disminución de la energía de intercambio en la región con forma de diamante que se genera en el centro del estadio, permitiendo así que se acomoden dos vórtices con diferente quiralidad.



Figura 3.5: Instantáneas del proceso de reversión de un estadio con S = 160 nm para diferentes valores de campo. La reversión se inicia con el sistema saturado frente a un campo a lo largo del eje x, como se representa en (a). Los momentos magnéticos del core, en color verde y amarillo (azul y morado) apuntan a lo largo de la dirección +z (-z). Los momentos magnéticos en rojo están en el plano x - y. Se evidencian claramente dos vórtices con la misma quiralidad, lo que genera un antivórtice en el centro. Por ello este modo lo denotamos VAV.

Incrementando *S* se genera un nuevo proceso de reversión. Para $150 \le S \le 170$ nm, tamaños que denotaremos región III, aún es posible observar una reversión de la magnetización conducida por la propagación de uno o dos vórtices con diferentes quiralidades.

Sin embargo, podemos también observar en algunas semillas la nucleación de dos vórtices con la misma quiralidad. En este nuevo modo, denotado VAV e ilustrado en la figura 3.5, los vórtices nuclean en un mismo extremo, generando un antivórtice en el centro de la partícula. Este par vórtice-antivórtice ha sido observado previamente por Shigeto *et al.* en láminas delgadas de permalloy [Shigeto et al., 2002].



Figura 3.6: Representación esquemática de los tres modos de reversión: (a) representa un vórtice, (b) representa dos vórtices con distinta quiralidad con un diamante en el centro y (c) representa dos vórtices con igual quiralidad y un antivórtice en el centro.

Finalmente, para $180 \le S \le 200$ nm, ya no es posible invertir la magnetización mediante un único vórtice, y la reversión es siempre conducida por la nucleación de dos vórtices con la misma o diferente quiralidad. Una representación esquemática de los tres

3.3. Resultados

modos de reversión para las cuatro regiones es ilustrada en la figura 3.6. En la figura 3.6(a) ilustramos la nucleación de un único vórtice (V), la de dos vórtices con diferente quiralidad y la región tipo diamante en el centro en la figura 3.6(b) y los dos vórtices con igual quiralidad junto con el antivórtice en la figura 3.6(c).

Un esquema de un antivórtice generado en el modo VAV se muestra en la figura 3.7. La existencia de dos vórtices con igual quiralidad produce una región central en la cual aumenta la energía de intercambio.



Figura 3.7: Representación esquemática de un antivórtice. (a) Ilustración del modo de reversión. (b) Representación de la configuración de la magnetización en el centro del estadio. El color verde representa los momentos en el plano en las cercanías del centro del antivórtice.

Para disminuirla, el antivórtice decrece la componente de la magnetización en el plano de la partícula, generando una componente de la magnetización a lo largo del eje z. Este modo de reversión es el que exhibe la mayor componente de la magnetización perpendicular al plano, dado por el núcleo de los dos vórtices y la magnetización a lo largo de z del antivórtice. La figura 3.8 muestra un antivórtice definido por vórtices en sentido horario (a) y antihorario (b), los que difieren en una rotación en $\pi/2$.



Figura 3.8: Representación esquemática de un antivórtice en función de la quiralidad de los vórtices que lo forman. (a) ilustra dos vórtices con sentido horario (C) y su correspondiente antivórtice. (b) representa dos vórtices con sentido antihorario (CC) y su correspondiente antivórtice. Ambos antivórtices son equivalentes con una rotación de $\pi/2$.

Algunas diferencias entre los modos VAV y VV pueden ser comprendidas a partir de la figura 3.9. En la figura superior observamos cómo se generan dos vórtices de igual quiralidad, dejando un antivórtice central.

En este caso se evidencia que los dos vórtices nuclean al mismo lado (eje y) y se propagan a lo largo de la misma dirección, perpendicular al campo. El vórtice 3 en esta figura no está permitido debido al fuerte aumento de la energía de intercambio asociada a sus momentos magnéticos y la región ferromagnética central en el estadio. De esta forma tenemos el modo VAV. Análogamente, en la figura 3.9b se observan dos vórtices con diferente quiralidad, los que originan la región central tipo diamante. En este caso los vórtices nuclean en diferentes lados y se propagan en direcciones opuestas, perpendicular al campo. El vórtice 2, en cambio, no puede generarse en este caso debido al fuerte incremento de la energía de intercambio asociado a la interface entre el vórtice 2 y la región ferromagnética central del estadio. En este caso tenemos un modo VV.



Figura 3.9: Representación esquemática de la nucleación de dos vórtices. (a) Muestra la formación de un antivórtice debido a la nucleación de los dos vórtices en la misma región (modo de reversión VAV). (b) Presenta la formación de un diamante debido a la nucleación de dos vórtices en diferentes regiones (modo de reversión VV).

Un resumen de nuestros resultados para las cuatro regiones de tamaño investigadas se presenta en la tabla 3.1. Las regiones 2 y 3 corresponden a zonas de transición entre la existencia de un vórtice (región 1) y dos vórtices (región 4). En la región 2 no es posible observar dos vórtices con igual quiralidad debido a que, en este caso, la existencia de un antivórtice central aumenta la energía de intercambio. En sistemas de tamaño mayor este aumento de energía es compensado debido a que existe una región de tamaño mayor que puede permitir un cambio paulatino, sin un mayor costo energético, de la dirección de los momentos magnéticos hacia el eje z. Finalmente, en la región 4 pueden generarse dos vórtices con igual o distinta quiralidad.

	Modos	de	Reversión	
Región	1	2	3	4
S (nm)	0 - 90	100 - 140	150 - 170	180 - 200
Modos	V	V y VV	V, VV y VAV	VV y VAV

Tabla 3.1: Modos de reversión de la magnetización observados en una nanoestructura con forma de estadio para diferentes tamaños. V denota una reversión conducida por un único vórtice; VV denota la generación de dos vórtices de diferente quiralidad, que generan un diamante en el centro; y VAV denota una reversión conducida por dos vórtices de igual quiralidad que generan un antivórtice en el centro.

3.4. Conclusiones

En este trabajo, y mediante simulaciones numéricas, investigamos los modos de reversión presentes en partículas con forma de estadio. Según sea el valor del parámetro de tamaño *S* observamos la nucleación de uno o dos vórtices como función de la longitud de la región central del estadio. Cuando dos vórtices nuclean, en la región central, y dependiendo de la quiralidad relativa de los vórtices, puede generarse un diamante o un antivórtice. Cuando dos vórtices nuclean en lados opuestos del estadio, se propagan en direcciones opuestas y perpendiculares al campo aplicado. Cuando dos vórtices nuclean en el mismo lado del estadio, se propagan a lo largo de la misma dirección y generan en el centro un antivórtice. Este comportamiento se explica esquemáticamente como resultado de la competencia entre la interacción de intercambio y la dipolar. Finalmente nuestros resultados pueden ser usados como guía para el control del proceso de nucleación en estadios de distintos tamaños.

Las configuraciones obtenidas son estables a temperaturas de operación de diversos dispositivos, y es justamente su anisotropía de forma la que ayuda a elevar la temperatura de bloqueo del sistema, contribuyendo a esta estabilidad.

Los resultados de este trabajo forman parte del articulo "Mechanisms of magnetization reversal in stadium-shaped particles", de los autores S. Castillo-Sepúlveda, D. Altbir, N. M. Vargas y S. Allende, publicado en la revista Journal of Applied Physics [Castillo-Sepúlveda et al., 2012].

Capítulo 4

Modos de reversión en anillos pequeños: Patrones en la susceptibilidad

4.1. Introducción

Las estructuras con forma de anillo han sido objeto de intenso estudio en la última década. La geometría de dichas estructuras se define por los diámetros externo e interno, D y d respectivamente, y por el espesor, t. Diversos experimentos así como simulaciones micromagnéticas en tales sistemas han identificado tres configuraciones estables de la magnetización. Una de ellas presenta los momentos magnéticos orientados fuera del plano del anillo; y dos configuraciones contienen momentos magnéticos mayoritariamente en el plano. Estas últimas son un estado llamado cebolla, similar a un monodominio en el plano, y un estado de vórtice [M. Grimsditch and Schuller, 1998, Abraham et al., 2001, Cowburn et al., 1999, Hwang et al., 2000, Lebib et al., 2001]. El estado cebolla es en general obtenido durante la reversión de la magnetización desde la saturación, y está caracterizado por la presencia de dos paredes "head to head" diametralmente apuestas [Klaüi et al., 2003, Castaño et al., 2003], como se observa en la figura 4.1. Tanto el estado cebolla como el ferromagnético fuera del plano presentan una magnetización total no nula, por lo que el campo desmagnetizante produce pequeñas desviaciones en la dirección de los momentos magnéticos que se encuentran cerca de los bordes de la partícula, conocidas como dominios de borde [Lebib et al., 2001, Fruchart et al., 1999, Yu et al., 1999]. Por consiguiente, en estos estados la magnetización del anillo puede ser muy sensible a fluctuaciones de forma y rugosidad de la superficie, lo que finalmente genera procesos de reversión más complejos.



Figura 4.1: Representación esquemática del modo "cebolla" en el cual se resalta la presencia de las paredes head to head.

En la configuración de vórtice, los momentos magnéticos circulan alrededor del eje del anillo, y por ello la mayor parte del flujo magnético está confinado dentro de la partícula. De esta forma las propiedades magnéticas son muy poco sensible a imperfecciones en la superficie. Además, la ausencia de la región central en la cual su ubicaría el núcleo disminuye la energía dipolar, estabilizando el estado del vórtice, dando lugar a un proceso de reversión de la magnetización simple y reproducible. En consecuencia, la determinación de las condiciones para que ocurra el estado de vórtice en anillos de tamaño nanométrico se ha convertido en un tema clave para la producción de nuevos dispositivos magnéticos.

Además de los estados de remanencia descritos más arriba, durante los procesos de reversión de la magnetización es posible observar diversas configuraciones de los momentos magnéticos, tales como paredes transversales y paredes de dominio de 360°. He *et al.* [He et al., 2010], mediante experimentos y simulaciones, investigaron el efecto de la quiralidad del vórtice y de la anisotropía de forma en la reversión de la magnetización en anillos de Co de 400 nm, evidenciando la formación de diferentes paredes de dominio. Recientemente, Ren *et al.* [Ren et al., 2013] exploraron la dependencia angular de la reversión de la magnetización en anillos alargados acoplados, y encontraron que la introducción de anisotropía de forma afecta la formación de un vórtice y genera diferentes mecanismos de reversión. En un interesante trabajo, Gonzalez-Oyarce *et al.* [Oyarce et al., 2013] reportaron los modos de reversión de anillos ferromagnéticos y concluyeron que el proceso de produce a través de la nucleación y propagación de paredes de 360°.

Estos trabajos, y varios otros, se enfocan en anillos con dimensiones de 100 nm o mayores, pero los anillos de tamaños pequeños han sido escasamente estudiados. Es por ello que en este trabajo investigamos los procesos de reversión de la magnetización de pequeños anillos aislados (D < 100 nm), como se representa en la figura 4.2, buscando generalizar los resultados obtenidos en sistemas de tamaño mayor a estos resultados.

4.2. Modelo

Comenzamos nuestro estudio considerando un anillo circular uniforme de hierro con un diámetro externo D de entre 70 y 100 nm, y un diámetro interno d de entre 15 y 55 nm. El espesor del anillo se mantiene fijo en t = 9.2 nm (ver figura 4.2).



Figura 4.2: Representación esquemática del sistema y sus parámetros geométricos. *D* representa el diámetro externo, *d* el diámetro interno y *t* el espesor.

Para ayudarnos a analizar nuestros resultados se definen dos parámetros, $\rho = D/2L_{ex}$, con L_{ex} la longitud de intercambio y $\beta = d/D$. Con estos parámetros un disco es definido por $\beta = 0.0$ y un anillo muy delgado es representado por $\beta = 1.0$. Para la longitud de intercambio del hierro usamos $L_{ex} = 2.3$ nm.

Para estudiar las propiedades magnéticas de anillos aislados usamos simulaciones de Monte Carlo que nos permiten obtener, los diferentes modos de reversión. Consideramos que los momentos magnéticos de cada átomo ocupan las posiciones de una red bcc de constante $a_0 = 0.28$ nm. La energía interna, \mathcal{E} de un sistema compuesto por Nmomentos magnéticos está dada por la suma de las energías de intercambio, de Zeeman y dipolar, definidas en las ecs. 2.1, 2.2 y 2.3 respectivamente. Por simplicidad no hemos incluido términos de anisotropía cristalina, que en hierro son prácticamente nulos. Por consiguiente, la energía del anillo estará dada por

$$\mathcal{E} = -J \sum_{\langle i,k \rangle}^{N} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{k} + \gamma_{D} \sum_{i \neq k}^{N} \frac{\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{k} - 3(\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{n}_{ik})(\mathbf{m}_{k} \cdot \mathbf{n}_{ik})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{k}|^{3}} - \sum_{i=1}^{N} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{H}_{a}.$$

4.2. Modelo

Para nuestras simulaciones, realizadas a T = 300 K, utilizamos los mismos parámetros usados previamente [Mejía-López et al., 2006, Mejía-López et al., 2010], y que nos han entregado un buen acuerdo con mediciones experimentales en dots de Fe. Estos parámetros son un momento magnético por átomo $m = 2.2\mu_B$, con μ_B el magnetón de Borh, y una constante de intercambio J = 40 meV. Para el tamaño de los anillos considerados en este trabajo, N sería mayor que 10^8 , demasiado grande para que una simulación que considere el carácter discreto del sistema sea manejable computacionalmente. Por lo tanto reemplazamos nuestro sistema por uno más pequeño, acorde con la técnica de escalamiento descrito anteriormente [d'Albuquerque e Castro et al., 2002, Vargas et al., 2006, Mejía-López et al., 2005]. Consecuentemente escalamos la interacción de intercambio por un factor $x \equiv J'/J = 0.006$, i.e., remplazamos J por J' = 0.24 meV en la expresión para la energía total. Las simulaciones de Monte Carlo se realizan usando el algoritmo de Metropolis con dinámicas locales y el método de un spin flip, acorde a lo descrito en el Capítulo 2.

Para describir el proceso de reversión de la magnetización saturamos nuestro sistema con un campo externo H = 8.0 kOe aplicado en la dirección del plano del anillo, como mostramos en la figura 4.2. Definimos M_s como la magnetización que presenta el sistema al campo magnético máximo (8.0 kOe), M_r como la magnetización de remanencia, y H_c como la coercitividad. Modelamos una curva de histéresis variando el campo en pasos de $\Delta H = 0.01$ kOe, de forma que utilizamos $3203 \ \Delta H$ pasos de campo para obtener la curva de histéresis completa. Es importante recordar que debido a la situación de no equilibrio, el número de pasos de Monte Carlo (MCS) por valor de campo utilizado es un aspecto crítico en la simulación de una curva de histéresis. Por consiguiente, primero estudiamos el efecto del número de pasos MCS en la coercitividad.

En la figura 4.3 se muestra el campo coercitivo para un anillo de diámetro interno y externo de 15 nm y 78 nm, respectivamente, en función del número de pasos de Monte Carlos. En la figura se evidencia que H_c converge asintóticamente a 0.925 kOe para 5000 MCS. Sin embargo, el efecto discutido aquí es cualitativamente similar para $MCS \ge 4500$, por lo que fijamos el número de pasos de Monte Carlo para cada valor de campo en 4500. Estos números son independientes del factor de escalamiento, como se discutió en el Capítulo 2. Para obtener resultados representativos utilizamos el promedio de seis cálculos iniciados con diferentes semillas.



Figura 4.3: Valores de la coercitividad para diferentes números de pasos de Monte Carlo MCS para un anillo de diámetro interno y externo de 15 y 78 nm, respectivamente.

Para estudiar los modos de reversión en estas estructuras, obtuvimos las curvas de histéresis y las curvas de susceptibilidad para diferentes tamaños de los anillos. Las curvas de susceptibilidad se obtuvieron mediante la derivada numérica, $\chi = \partial m / \partial H$, de la curva de histéresis. Para ello, tomamos la curva de histéresis promedio para distintas semillas de un mismo cálculo, y aplicamos el siguiente algoritmo (Diferencias centrales):

$$\chi(H_i) = \frac{m_{i+1} - m_{i-1}}{2\Delta H}$$

donde m_i es la magnetización del anillo en la dirección del campo aplicado en el *i*-esimo paso con un campo aplicado H_i . El promedio de las curvas de histéresis en las semillas nos ayuda a limpiar el ruido de forma de poder extraer información de las curvas de sus-ceptibilidad.

4.3. Resultados

En lo que sigue se describen los diferentes modos de reversión para anillos con D < 100 nm. Para mayor claridad clasificamos los modos de reversión según contengan o no la nucleación de un vórtice.

4.3.1. Modos conteniendo la nucleación de un vórtice

Existen dos modos de nuclear un vórtice en un anillo durante el proceso de reversión de la magnetización, ambos pasando a través del estado cebolla:

El primer modo de reversión lo llamaremos modo LV, y comienza por la nucleación de un vórtice localizado en el anillo, que se propaga de manera perpendicular al campo aplicado. La propagación de este vórtice culmina con la formación del vórtice en todo el anillo, como se observa en la figura 4.4.



Figura 4.4: Representación esquemática de procesos de reversión de la magnetización que conducen a la formación de un vórtice. Desde (a) hasta (b) vemos la nucleación y propagación de un vórtice local, mientras que de (b) a (c) observamos la formación del vórtice completo. Este modo se denota LV.

El segundo modo de reversión que origina un vórtice lo llamaremos modo DWV. Este consiste en que una vez formado el estado cebolla, que contiene dos paredes de dominio head-to-head, una de las paredes rota a través del anillo, formando un vórtice, como se observa en la figura 4.5.



Figura 4.5: Representación esquemática del proceso de reversión que conduce a la formación de un vórtice a partir de un estado cebolla. Desde (a) hasta (b) vemos la rotación de la pared de dominio alrededor del anillo, mientras que de (b) a (c) observamos la formación de un vórtice. Este modo se denota DWV. En las figuras 4.6 y 4.7 se ilustra la curva de histéresis (a) y de susceptibilidad (b), en unidades arbitrarias, de los dos modos de reversión descritos en las figuras 4.4 y 4.5 para anillos definidos por $\rho = 17$ y $\beta = 0.5$ (figura 4.6) y $\beta = 0.8$ (figura 4.7).



Figura 4.6: Curvas de histéresis (a) y susceptibilidad (b) para un anillo con $\rho = 17$ y $\beta = 0.5$. En este caso, la reversión ocurre por medio de un LV. La curva de susceptibilidad es obtenida a partir de la rama izquierda de la curva de histéresis. En (b) el punto (I.a) denota la nucleación de un vórtice localizado, (I.b) representa la existencia de un vórtice localizado, mientras que el punto (I.c) representa el modo vórtice global.



Figura 4.7: Curvas de histéresis (a) y susceptibilidad (b) para un anillo con $\rho = 17$ y $\beta = 0.8$. En este caso, la reversión ocurre por medio de la nucleación de dos paredes de dominio (DWV). La curva de susceptibilidad es obtenida a partir de la rama izquierda de la curva de histéresis. En (b) el punto (II.a) representa la configuración de la magnetización tipo cebolla, (II.b) representa la nucleación de un vórtice global, mientras que el punto (II.c) representa el modo vórtice global.

4.3. Resultados

La figura 4.6(a) representa la curva de histéresis del modo LV, mostrando el cuello típico cerca de M = 0, que denota la existencia de un vórtice. Un comportamiento similar de la curva de histéresis es presentado en la figura 4.7(a) para el modo DWV. Sin embargo, en este último caso se requieren campos más grandes para la nucleación y aniquilación del vórtice.

Dado que las curvas de histéresis de ambos modos son muy similares, no es posible determinar que modo de reversión ocurre a partir de estas curvas. Sin embargo las curvas de susceptibilidad son totalmente diferentes. En la figura 4.6(b) se representa la susceptibilidad del modo LV mostrando la aparición de dos máximos muy cercanos a campos bajos, que corresponden a la nucleación y aniquilación del vórtice local, seguidos por un tercer máximo durante la aniquilación del vórtice global.

En la susceptibilidad, el modo DWV se refleja en dos máximos de baja intensidad, muy cercanos en energía, que representan la nucleación y aniquilación de una pared de dominio, formando un vórtice global, seguidos por un máximo que representa la aniquilación de dicho vórtice, como se observa en la figura 4.7(b).

Vemos entonces que, si bien las curvas de histéresis son similares, las curvas de susceptibilidad nos permiten distinguir claramente entre ambos modos.

4.3.2. Modos que no contienen la nucleación de un vórtice

Ademas de los modos de reversión que conllevan la nucleación de un vórtice en el anillo, existen dos procesos de reversión que no involucran la nucleación de un vórtice.

- El primer modo de reversión lo llamamos modo "turned"(T), y se caracteriza por la nucleación de dos estados "C"que se mueven juntos hasta que revierte la magnetización, como se aprecia en la figura 4.8.
- El segundo modo de reversión que no involucra un vórtice en el anillo es el modo DW, que involucra la propagación de las paredes de dominio en los extremos del cebolla en direcciones opuestas en el anillo, como se observa en la figura 4.9.



Figura 4.8: Representación esquemática del proceso de reversión sin la formación de un vórtice en anillos definidos por $\rho = 19 \text{ con } \beta = 0.5 \text{ y } \beta = 0.8 \text{ mediante el modo T. Desde (a)}$ hasta (b) vemos la formación de los estados C, y de (b) hasta (d) vemos el movimiento de las paredes de dominio hasta formar un estado cebolla en la dirección opuesta al cebolla inicial.



Figura 4.9: Representación esquemática del proceso de reversión sin la formación de un vórtice mediante el modo DW. Desde (a) hasta (c) vemos el movimiento de las paredes de dominio durante la reversión de la magnetización de un cebolla hasta formar un cebolla en la dirección opuesta.

Las figuras 4.10 y 4.11 ilustran las curvas de histéresis en (a) y las curvas de susceptibilidad en (b), en unidades arbitrarias, de estos modos para anillos definidos por $\rho = 19$, con $\beta = 0.5$ (figura 4.10) y $\beta = 0.8$ (figura 4.11) respectivamente.



Figura 4.10: Curvas de histéresis (a) y susceptibilidad (b) para un anillo con $\rho = 19$ y $\beta = 0.5$. En este caso la reversión ocurre por medio de un modo T. La curva de susceptibilidad es obtenida a partir de la rama izquierda de la curva de histéresis. En (b) el punto (III.a) corresponde el inicio del movimiento de la primera pared de dominio, (III.b) representa el movimiento de ambas paredes de dominio, mientras que el punto (III.c) representa el movimiento de la segunda pared de dominio para formar el estado cebolla final.



Figura 4.11: Curvas de histéresis (a) y susceptibilidad (b) para un anillo con $\rho = 19$ y $\beta = 0.8$. En este caso la reversión ocurre mediante el modo DW. La curva de susceptibilidad es obtenida a partir de la rama izquierda de la curva de histéresis. En (b) el punto (IV.a) representa la configuración de la magnetización tipo cebolla inicial, (IV.b) denota el movimiento sincronizado de las paredes de dominio, mientras que el punto (IV.c) corresponde a una configuración tipo cebolla en la dirección opuesta.

En la figura 4.10(a) se presenta la curva de histéresis para el modo T, donde se evidencia un pequeño escalón cercano a m = 0. La correspondiente figura 4.10(b) muestra la existencia de dos máximos de similar intensidad en la susceptibilidad. Un comportamiento diferente se observa en la figura 4.11(a) para el modo DW, la que muestra un rápido proceso de reversión evidenciado por un ruido en la curva de susceptibilidad y un único e intenso máximo (ver figura 4.11(b)). En ambos modos, T y DW, el proceso completo se produce a campos más bajos comparados con los involucrados en los modos de reversión que forman vórtices.

Los mismos modos de reversión ocurren para todo el rango de β , si $\rho \leq 21$. Para $\beta = 0.2$, estos es, pequeños anillos gruesos, sólo aparecen los modos T y LV. Para $\beta = 0.8$, esto es, anillos delgados, todos los procesos de reversión ocurren por medio de la formación de paredes de dominios, es decir los modos DWV y DW.

Para entender la presencia o ausencia de vórtices nos enfocamos en particular en algunas características del proceso de reversión: el sitio en el cual se inicia la nucleación, en el caso de anillos gruesos; y en el alineamiento de las dos paredes de dominio, en anillos delgados.



Figura 4.12: Representación esquemática de los procesos de reversión. Un vórtice local aparece cuando la nucleación comienza en P, mientras que el modo turned es generado cuando la nucleación comienza en Q.

Para $\beta \leq 0.5$ y $\rho \geq 17$, los anillos son suficientemente gruesos como para permitir la formación de un vórtice local. Sin embargo, el modo LV aparece sólo si la nucleación ocurre en la región denotada por P en la figura 4.12, esto es, una región en la cual la for-

4.4. Conclusiones

mación y propagación del centro del vórtice localizado es estable debido a la existencia de momentos magnéticos que rodean la región central con una energía dipolar cercana a cero. Por el contrario, si la nucleación ocurre en la región señalada con Q, con $\theta > 40^{\circ}$, no puede formarse un vórtice pues los momentos magnéticos no pueden rodear completamente la región central de un vórtice localizado, durante la propagación de este. En este caso existe una interacción no nula entre la región central y los momentos magnéticos que lo rodean, que lo hace inestable. Por ello el sistema prefiere revertir su magnetización formando un estado C, generando lo que llamamos el modo de reversión T.

Para $\beta > 0.5$ y $\rho \ge 17$, el anillo es delgado y no puede acomodar un vórtice localizado. En este caso la reversión es conducida por la nucleación de dos paredes que generan un estado cebolla. Si ambas paredes nuclean de forma que están alineadas cuando se inicia la reversión, la energía dipolar es mínima y las dos paredes se mueven simultáneamente, manteniendo la orientación de sus momentos magnéticos y generando el modo que llamamos DW. Si ambas paredes tienen sus momentos alineados cuando se inicia la reversión, la energía dipolar no es mínima, y sólo una pared se moverá hacia la otra para formar un estado tipo vórtice, en lo que llamamos el modo DWV. Estos modos se describen en las figuras 4.9 y 4.5.

Por otro lado, estos modos poseen diferente perfil de susceptibilidad. En particular los dos modos que consideran la formación de paredes de dominio muestran un máximo claro y alguna estructura a su alrededor con máximos de menor intensidad que representan la nucleación y aniquilación de las paredes. Cuando se forma un vórtice, dado que esta es una estructura estable, se requiere un campo mayor para aniquilarlo, como se evidencia en el alto máximo presente en el modo DWV. Cuando no se forman paredes de dominio es posible observar dos máximos, uno representando la nucleación y el otro la aniquilación de la estructura magnética que conduce la reversión. Además, en este último caso, la distancia entre ambos máximos es diferente, siendo muy cercanos en el modo T. En el caso LV la ocurrencia de un vórtice estable durante la reversión estabiliza la magnetización y se requiere de un campo muy alto para completar el proceso de reversión, como en el modo DWV.

4.4. Conclusiones

En resumen, por medio de simulaciones de Monte Carlo exploramos los modos de reversión de anillos con diámetros menores a 100 nm, dimensiones que no han sido aún sistemáticamente exploradas. En este régimen se han obtenido cuatro modos de reversión diferentes en función de la geometría del anillo. Estos modos pueden ser agrupados en dos categorías. Dos de ellos involucran las formación de un vórtice (DWV y LV), y dos no generan vórtices (DW y T). También se pueden clasificar de acuerdo a si consideran

o no la propagación de paredes de dominio. Esto es, dos modos consideran la propagación de una pared de dominio (DWV y DW) y dos no incluyen paredes de dominio (LV y T). Estos modos aparecen para diferentes geometrías. Mientras los anillos delgados prefieren la formación de paredes, estas no se evidencian en anillos gruesos. Los anillos de espesor medio pueden presentar los cuatro modos de reversión en función del parámetro ρ . Algunos de estos modos no son distinguibles a través de las curvas de histéresis, pero sus diferencias aparecen claramente en la susceptibilidad, haciendo de estas curvas una herramienta útil para la identificación inequívoca de los procesos de reversión involucrados, sin necesidad de observar directamente estos estados, o de obtener múltiples curvas requeridas para el análisis FORC.

Los resultados de este trabajo forman parte del articulo "Reversal modes in small rings: Signature on the susceptibility", de los autores S. Castillo-Sepúlveda, N. M. Vargas, R. A. Escobar, S. E. Baltazar, S. Allende, y D. Altbir, publicado en la revista Journal of Applied Physics [Castillo-Sepúlveda et al., 2014].

Capítulo 5

Estados magnéticos metaestables no colineales en cadenas antiferromagnéticas

5.1. Introducción

Actualmente, una gran variedad de estructuras con forma de anillos unidimensionales con diferentes ejes de anisotropía pueden ser producidas experimentalmente. Entre ellas podemos mencionar arreglos de espines atómicos [Zhou et al., 2010, Hague et al., 2009, Friedman et al., 1996], arreglos magnéticos nanométricos [Behin-Aein et al., 2010, Morgan et al., 2011, Schumann et al., 2012], y estructuras moleculares con forma de anillo [Cador et al., 2005, Bernot et al., 2006, Wernsdorfer, 2007]. Si bien estos estudios han abordado y clarificado diversos aspectos, un número significativo de resultados experimentales está aún sin una explicación válida. Particularmente, resultados en cadenas atómicas magnéticas abiertas y cerradas descritos en [Zhou et al., 2010] muestran un mayor desorden que el que describe la descripción analítica a partir del modelo de Ising. Por ello nos preguntamos si la topología del sistema puede ser responsable de las desviaciones experimentales con respecto a los modelos convencionales utilizados en estructuras lineales cerradas con condiciones de frontera cuasi-periódicas. Así mismo, resulta interesante entender el rol de la energía libre en la formación de los estados. Siguiendo estas ideas, en este trabajo estudiamos las configuraciones magnéticas en equilibrio de cadenas y anillos formados por momentos magnéticos efectivos acoplados mediante interacciones de corto y largo alcance. El objetivo principal de nuestro trabajo es determinar si existen estados magnéticos no colineales diferentes de los estados magnéticos colineales fundamentales en geometrías cerradas. En particular nos interesan los estados no colineales que aparecen en anillos antiferromagnéticos en los cuales, si contienen un número impar de momentos magnéticos, se genera un sistema frustrado. Esto debido a que un número impar de momentos magnéticos con interacción antiferromagnética introduce una inconmensurabilidad en el sistema. Mediante modelos teóricos y simulaciones de Monte Carlo estudiamos el efecto de cambiar el número de átomos, la constante de anisotropía y la energía dipolar en configuraciones estables

Al respecto ha sido reportado que los estados no colineales metaestables existen, no sólo en estructuras lineales abiertas, sino que también en estructuras lineales cerradas, debido al intrincado perfil de energía libre que presentan. Las configuraciones magnéticas tipo bandas de möbius pueden ser obtenidas no sólo en estructuras magnéticas impares como inicialmente se había predicho, sino también es posible estabilizarlas en estructuras lineales cerradas con un número par de espines. El tiempo de vida de los estados metaestables con interacción dipolar es mayor o igual al tiempo de observación característico de los experimentos, lo que explicaría recientes resultados experimentales obtenidos en ensambles magnéticos.

Recientemente en cadenas lineales abiertas [Vedmedenko and Altwein, 2014, Popov et al., 2015] se han reportado configuraciones magnéticas tipo hélice que contienen un cierto número de espirales claramente identificables, y que son energéticamente estables en sistemas con momentos magnéticos acoplados mediante la interacción de intercambio (ver figura 5.1). En la referencia [Vedmedenko and Altwein, 2014] estos estados han sido introducidos en las cadenas mediante la rotación de uno de sus extremos, enrollándolo como un resorte y luego fijando los dos extremos. Por ello, uno de nuestros objetivos en este trabajo es determinar si geometrías cerradas pueden también mostrar soluciones metaestables de este tipo y como la anisotropía local influencia estos estados. La relación entre la anisotropía y la estabilidad es muy importante, debido a que en diversos sistemas experimentales se han observado paredes de dominio, aún cuando las predicciones teóricas indiquen que las paredes de dominio son energéticamente inestables.



Figura 5.1: (a) Configuración AFM, (b) configuración AFSS y (c) configuración KS.

Un hecho importante es que en ausencia de interacciones de largo alcance, si consideramos sólo interacción a primeros vecinos, o interacciones de anisotropía que dependen únicamente del momento magnético atómico en su sitio, entonces, los estados encontrados en un anillo son posibles también en cualquier cadena cerrada, sea una elipse, un cuadrado, etc, al igual que son posibles en cualquier cadena lineal con un número grande de átomos que presenten ciertas condiciones de periodicidad.

5.2. Modelo

Para nuestros cálculos utilizamos un modelo atómico tipo Heisenberg. En particular, consideraremos anillos formados por una cadena circular de átomos de hierro separados entre si una distancia a = 2.8 Å. Esta es una distancia típica entre átomos en materiales ferromagnéticos tales como el hierro. Cada átomo se representa por un momento magnético \mathbf{m}_i , con $m = 2.2\mu_B$, describiendo así una típica cadena atómica o molecular. Los momentos magnéticos pueden estar acoplados mediante interacciones dipolares y de intercambio, y experimentan un campo anisotrópico, de forma que su energía puede describirse como:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (E_{ij} - J_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) + K \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{z})^2,$$

donde E_{ij} es la energía dipolar dada por

$$E_{ij} = D\gamma_D \sum_{i,j} \frac{\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{m}_i)(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{m}_j)}{r_{ij}^3}.$$

Con $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \mathbf{y} \mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/r_{ij}$. En estas expresiones D es una constante que posibilita incorporar o no energía dipolar, dependiendo si D = 1 o D = 0. La constante de intercambio J_{ij} es igual a J = -40 meV para momentos magnéticos primeros vecinos acoplados antiferromagnéticamente, y cero en otro caso. K es la constante de anisotropía que representa la dirección del eje fácil de la magnetización en el anillo tal que K < 0 describe un eje fácil en la dirección z y K > 0 es usado cuando el eje duro es z.

Para una mejor comprensión de los resultados, comenzaremos nuestro estudio con cálculos analíticos de la energía interna de un anillo magnético sujeto a una anisotropía local con sus momentos magnéticos vecinos acoplado mediante interacción de intercambio antiferromagnética. El estado fundamental de tales anillos con un número par de partículas corresponde a un alineamiento antiparalelo colineal de los momentos vecinos. Esta configuración antiferromagnética ideal AFM no es posible en anillos que contienen un número impar de momentos magnéticos. En este caso, las configuraciones de tipo bandas de möbius magnéticas, o las hélices antiferromagnéticas, AFSS por sus siglas en inglés



Figura 5.2: Energía interna de un estado puro AFSS para N par o impar. Cuando N es par, el estado AFSS es idéntico al estado AFM.

(antiferromagnetic spin spiral), han sido presentadas como estados de mínima energía de estos anillos [Zhou et al., 2010].

Por otro lado, experimentalmente se han encontrado en sistemas laminados los llamados solitónes de enrollamiento, KS por sus siglas en inglés (kink-solitón) [Fernández-Pacheco et al., 2012]. Estas estructuras difieren de la configuración hélice magnética ya que consisten en dominios antiferromagnéticos ideales separados por un solitón. Estos solitones son muy importantes tecnológicamente, pues pueden ser utilizados como bits de información en sistemas de almacenamiento magnético, y en dispositivos lógicos [Petit et al., 2016, Lavrijsen et al., 2013, Fernández-Pacheco et al., 2012].

En nuestro estudio analítico tomamos los solitónes en cuenta explícitamente. Si consideramos una cadena cerrada con N momentos magnéticos, un solitón contiene M momentos magnéticos, con M < N. De esta forma, la región antiferromagnética esta formada por N - M momentos magnéticos. La energía del anillo tiene entonces dos contribuciones, la del solitón y la del dominio antiferromagnético.

Primero estudiemos la situación con M = N, esto es, tenemos una hélice tan amplia como el anillo mismo. La magnetización de dicha hélice puede ser descrita como $\mathbf{m}(r) = (\sin(\Delta\theta r)), 0, \cos(\Delta\theta r))$, donde r es la coordenada de posición a lo largo del anillo. La figura 5.2 ilustra la energía interna E para cadenas con estas hélices formadas por un número par e impar de sitios (ver detalles del cálculo en el apéndice A). Para anisotropías bajas, |K| < |J|, y D = 0, el estado de mínima energía para N corresponde a la configuración antiferromagnética, que es equivalente a una hélice magnética con $\Delta \theta = \pi$. Cualquier otra hélice con un paso diferente posee mayor energía. La energía total de una hélice magnética en una cadena con un número impar de momentos magnéticos es siempre mayor que la de la cadena con el número par de momentos magnéticos más cercano al número impar, $N_{par} = N_{impar} \pm 1$. Cuanto mayor es la longitud de estas cadenas, mayor es la diferencia en la energía total de cadenas con diferencia de longitud de un sitio atómico. Esto debido a que si se tiene una cadena de longitud N par, las cadenas de longitudes dadas por $N \pm 1$ contendrán un número impar de sitios y, por consiguiente, serán sistemas frustrados. De nuestros cálculos (ver apéndice A), obtenemos que la energía interna para cadenas con N impar puede ser reducida si sustituimos la hélice magnética por una combinación de un dominio antiferromagnético con un solitón.

Para entender mejor lo que ocurre en estos sistemas, calculamos la diferencia $\Delta E_N = E(AFSS) - E(KS)$ entre la energía de la hélice magnética y el solitón como una función de M. Al respecto encontramos que la energía total de una solución con un solitón es ligeramente mayor que la obtenida por cadenas con un número par de momentos magnéticos de longitud similar ± 1 . Sin embargo, soluciones de tipo solitón de un cierto ancho minimizan la energía respecto de la hélice magnética, que pudiera entenderse como un estado con un solitón con N = M. La figura 5.3(a) representa ΔE_N para N = 31, J = 1.0 y diferentes valores de K, mientras que la figura 5.3(b) ilustra el tamaño del solitón que minimiza la energía como una función de J para N = 31. Si $\Delta E_N = E(AFSS) - E(KS) < 0$, el estado de mínima energía es la hélice magnética, mientras que si $\Delta E_N = E(AFSS) - E(KS) > 0$, el estado de mínima energía corresponde a una configuración con un solitón. De las figuras se evidencia que grandes valores de K están asociados a solitónes con un ancho pequeño. Este resultado está en buen acuerdo con los experimentos: cuanto mayor es la anisotropía, más angostas son las paredes de dominio. Por lo tanto, desde un punto de vista de la energía interna, el estado fundamental de los anillos con un número par de momentos magnéticos es una configuración ideal antiferromagnética, mientras que en anillos con un número impar de momentos magnéticos, el estado fundamental corresponde a configuraciones que contienen un solitón cuyo ancho depende de los parámetros del material.

A continuación analizamos la configuración excitada de menor energía para anillos con un número par de momentos magnéticos a partir de su energía libre. Dado que las hélices magnéticas son soluciones exactas del Hamiltoniano de Heisemberg en sistemas periódicos, la configuración magnética de los estado excitados puede ser encontrado en el espacio de fase de hélices magnéticas no colineales [Sandratskii, 1991].



Figura 5.3: (a) Diferencia entre las energías internas del estado AFSS y el estado KS para N = 31, J = 1, y diferentes valores de K. $\Delta E > 0$ indica que un solitón esta presente (b) tamaño del solitón como función de la anisotropía para N = 31.

Por simplicidad restringiremos nuestro cálculo al caso de anisotropía magnética perpendicular al plano del anillo. Para ello elegimos configuraciones magnéticas en forma de hélices con extremos fijos con vector de ondas $\Delta\theta$ y calculamos la correspondiente energía $E(\Delta\theta)$ analíticamente o usando simulaciones de Monte Carlo. Sorprendentemente, junto a los mínimos globales de energía correspondientes a configuraciones con todos los momentos magnéticos paralelos y antiparalelos al eje z, la energía de anisotropía de una cadena con interacciones entre momentos magnéticos muestra mínimos de energía adicionales correspondientes a estados no colineales. El número de estos mínimos de energía locales adicionales es proporcional al número de momentos magnéticos N en una cadena o estructura cerrada.



Figura 5.4: Resultados analíticos de (a) la energía interna y (b-d) la energía libre de Gibbs de cuatro momentos magnéticos efectivos acoplados mediante interacción de intercambio a primeros vecinos J y sujetos a una anisotropía uniaxial K como función del vector de ondas δ correspondiente al ángulo entre los primeros vecinos $\Delta\theta$. Se presenta el caso en que la energía de anisotropía es dominante K >> J. En el cuadro (a) muestra la energía interna en las coordenadas de fase θ_1 - $\Delta\theta$, donde θ_1 es el ángulo polar esférico del primer momento magnético. El color va de oscuro (azul) para las energías más bajas a brillante (amarillo) para las energías más altas. (b,c) muestran la energía de Gibbs G del mismo sistema en el espacio de fase a $k_BT = 0.2K$ y $k_BT = 0.35K$ respectivamente ($\rho = 100$). (d) Cortes de las funciones (a-c) para $\Delta\theta = \pi/2$ y $\Delta\theta = 2\pi/3$.

Un ejemplo de un perfil de energía interna está dado en la figura 5.4(a) para una cadena de cuatro momentos magnéticos sujetos a una anisotropía uniaxial $-KS_{iz}^2$ perpendicular al plano de la cadena, y una interacción de intercambio J < 0. Este ejemplo muestra el caso de hélices magnéticas armónicas con un ángulo entre momentos magnéticos primeros vecinos igual a $\Delta \theta \in [0, \pi]$. Sólo el ángulo entre el primer y el último vecino en la cadena puede ser diferente de $\Delta \theta$ si $N\Delta \theta/\pi$ es un entero. La abcisa representa el ángulo esférico polar θ_1 del primer momento magnético con respecto al eje z. La hélice es bidimensional, de forma que los cuatro momentos magnéticos tienen las siguientes componentes de S_z : $\cos(\theta)$, $\cos(\theta + \Delta \theta)$, $\cos(\theta + 2\Delta \theta)$, y $\cos(\theta + 3\Delta \theta)$. En este caso, las tres configuraciones periódicas no triviales correspondientes a $\Delta \theta = \pi/4, \pi/2, 3\pi/4$ definen una rotación total en $\pi, 2\pi, 3\pi$ en una cadena, respectivamente. Para |K| >> |J|, estas configuraciones corresponden a la banda de energía más baja de puntos silla como se observa en la figura 5.4(a), que tiene una energía constante de -2K. Ademas, hay 12 mínimos locales de energía (azul en la figura 5.4(a)). Seis de ellos (azul oscuro) corresponden a estados fundamentales colineales, pero los otros seis (azul claro) se corresponden con configuraciones magnéticas metaestables no colineales con $\Delta \theta = \pi/3$ o $2\pi/3$. Luego, en cadenas muy cortas con un número par de momentos magnéticos a temperatura cero, los momentos magnéticos pueden ser congelados en un estado no colineal si la anisotropía es alta. La inclusión del acoplamiento dipolar no interfiere en este efecto.

Para estudiar la influencia de temperaturas finitas en estos mínimos de energía local, calcularemos el perfil de la energía libre para el ejemplo de los cuatro momentos magnéticos ya discutido. La energía libre puede ser calculada como

$$G = E - T \cdot S = E - k_B T \ln(\Omega_E),$$

donde *E* es la energía interna, k_B es la constante de Boltzmann, *S* la entropía, y Ω_E el número de estados con energía *E*. Ω_E es uno para cada uno de los seis estados colineales que se muestran en la figura 5.5. Para estos estados se puede obtener el número de estados Ω_E como $\Omega_{E(\theta_1,\Delta\theta)} = (\rho \cdot \sin \theta_1)(\rho \cdot \sin \Delta\theta)^3$, con ρ la densidad de estados. Esto debido a que el primer momento magnético puede tener $\rho \cdot \sin \theta_1$ orientaciones, y por cada una de estas orientaciones, sus vecinos pueden tener $\rho \cdot \sin \Delta\theta$ orientaciones. Lo mismo ocurre para los otros dos momentos magnéticos obteniedo una expresión para la entropía dada por

$$S = 4k_B \ln \rho + k_B \ln(\sin \theta_1) + 3k_B \ln(\sin \Delta \theta)$$

La figura 5.4(b,c) representa $G(\theta_1, \Delta \theta)$ para dos temperaturas diferentes, mientras que en la figura 5.4(d) se muestra un corte de la energía libre representada en la figura 5.4(ac) para *J* despreciable. Las dos líneas sólidas en la figura 5.4(d) representan el corte mostrado en la figura 5.4(a). Las líneas rectas muestran la banda de puntos sillas en $\Delta \theta = \pi/2$, mientras la línea sinusoidal corresponde al mínimo local de energía en $\Delta \theta = 2\pi/3$. Las líneas punteadas y rayadas corresponden a la energía libre para $\Delta \theta = 2\pi/3$ con $k_BT = 0.2K$ y 0.35K respectivamente. La densidad de estados ρ cambia los valores absolutos de *G* pero no cambia las posiciones y forma de los mínimos y máximos. Para anillos grandes, el número de configuraciones no colineales se incrementa.


Figura 5.5: Estados magnéticos colineales en cadenas de cuatro momentos magnéticos.

Notemos que la entropía provoca cambios significativos en el perfil de energía interna. Particularmente, la entropía de una configuración no colineal provoca mínimos de energía mucho más pronunciados que en el caso de los estados colineales. Como una consecuencia, el mínimo de energía local en $\theta_1 = 0$ se divide. La división se incrementa con la temperatura y corresponde a estados no colineales complejos. Por lo tanto, los mínimos locales de la energía libre en cadenas periódicas deben corresponder a espirales homogéneas y son muy importantes en la determinación de las configuraciones de magnetización a temperaturas finitas, particularmente si el tiempo en que existen estos estados metaestables es igual o mayor que la escala de tiempo característica de la medición. Otra observación interesante de la figura 5.4 es que el mínimo local de la energía libre corresponde a una hélice magnética no homogénea, esto es, en algunas partes de la hélice la rotación ocurre más rápido que en otras. Uno puede considerar tales configuraciones como dominios antiferromagnéticos casi colineales con un solitón estre ellos. Esto explicaría porque uno encuentra paredes de dominio en sistemas antiferromagnéticos, donde las paredes de dominio son energeticamente desfavorables. En sistemas reales se deben considerar las rotaciones en tres dimensiones de los espines, además de las interacciones dipolares entre los espines. Esto hace el espacio de fase muy complejo e inaccesible para cálculos analíticos.

Para verificar la estabilidad de las soluciones metaestables, realizamos simulaciones de Monte Carlo en cadenas magnéticas finitas con momentos magnéticos efectivos acoplados por la interacción dipolar y de intercambio antiferromagnético, sujeto a una anisotropía uniaxial local. En estas cadenas, la paridad del número de momentos magnéticos es muy importante. Nuestras simulaciones se realizan con el algoritmo de Metrópolis bajo dinámica local y el método de single spin-flip [Binder and Heermann, 2002].

5.3. Resultados

Para distinguir los efectos causados por las diferentes energías involucradas, comenzamos buscando los estados del sistema considerando por separado cada contribución a la energía (intercambio, dipolar y anisotropía).

Consideremos un anillo en el cual los momentos magnéticos interactúan dipolarmente, en ausencia de contribuciones de la energía de intercambio y anisotropía, esto es J = K = 0. En este caso, independiente del número de momentos magnéticos en el anillo, la configuración magnética remanente es el estado de vórtice, como se ilustra en la figura 5.6. En el caso anisotrópico puro, esto es, J = D = 0, hay dos situaciones que deben ser analizadas por separado.



Figura 5.6: Configuración de un vórtice: La figura muestra la configuración magnética del anillo con N = 50 cuando sólo hay interacción dipolar.

Cuando K < 0, el eje fácil está a lo largo del eje z, y si K > 0, la dirección fácil está en el plano del anillo. Cuando K < 0 los momentos magnéticos se alinean entre ellos paralelos al eje z, pero la orientación a lo largo del eje fácil (up o down) es aleatoria, como muestra la figura 5.7(a). Cuando K > 0, el anillo exhibe una magnetización en el plano. En

5.3. Resultados

esta situación, al igual que en el caso anterior, los momentos magnéticos en el plano están orientados aleatoriamente, como evidencia la figura 5.7(b).



Figura 5.7: Configuración de la magnetización del anillo con (a) K < 0 y (b) K > 0.

También consideramos el caso en que sólo hay interacción de intercambio antiferromagnético, esto es K = D = 0, J > 0. En este caso, las diferencias aparecen cuando consideramos anillos con un número impar o par de momentos magnéticos, considerando por separado dos situaciones, N = 50 y N = 51. Con un número par de momentos magnéticos, y sin anosotropía e interacción dipolar involucrada, nuestro sistema exhibe un perfecto orden antiferromagnético perfectamente ordenado a lo largo de una dirección, como se muestra en la figura 5.8.



Figura 5.8: Configuración antiferromagnética (**AFM**). Observamos en (a) la configuración **AFM** y en (b) la representación extendida de esta configuración.

Cuando incluimos una momento magético adicional, N = 51, la frustración genera un solitón para bajar la energía en el anillo, como muestra la figura 5.9. Los mínimos de energía local descritos en la figura 5.4 no sobreviven en las simulaciones de Monte Carlo, pues su tiempo de vida es muy corto y las barreras de energía pueden ser fácilmente sobrepasadas.

Una vez que analizamos por separado el papel de cada contribución a la energía, tomamos en cuenta todas las contribuciones juntas, es decir, D = 1, J = -40 meV y $K = \pm 0.01$ en unidades de J, con N = 100 y 101. En general aparecen tres tipos de estructuras. Para N par y K < 0 aparece un orden antiferromagnético perfecto, como se ilustra en la figura 5.8. Para N par y K > 0, y como resultado de la competencia de las diferentes interacciones, aparece un knot (ver figura 5.9). Cuando N es impar, aparece una frustración que puede ser de dos tipos, dependiendo de la dirección del eje fácil. Cuando el eje fácil está en el plano, los momentos magnéticos se orientan formando un solitón, como se muestra en la figura 5.9. Cuando el eje fácil está fuera del plano, el ordenamiento magnético es también un solitón, pero con una orientación diferente, tal como se representa en la figura 5.10. Estos dos tipos diferentes de solitón son nombrados **KSN** y **KSB**, debido a la similitud que mostraron con las paredes de Néel (ver la figura 5.9) y de Bloch (ver la figura 5.10), respectivamente. Para K = 0, las configuraciones **KSN** y **KSB**:



Figura 5.9: Configuración tipo **KSN**. Observamos en (a) la configuración **KSN** y en (b) la representación extendida de esta configuración.



Figura 5.10: Configuración tipo **KSB**. Observamos en (a) la configuración **KSB** y en (b) la representación extendida de esta configuración.

También observamos una relación entre el número de solitónes, el número de momentos magnéticos del anillo y la magnitud de la anisotropía. Para un número impar de sitios, todos los anillos exhiben solitónes debido a las frustraciones geométricas. Es interesante considerar que hemos hallado solitónes también en anillos antiferromagnéticos con un número par de momentos magnéticos efectivos. Cuando tenemos un número par de momentos magnéticos, menor es este valor crítico de la anisotropía. Por ejemplo, para K = 0, se requiere una longitud mínima de 100 momentos magnéticos para observar el primer solitón en el anillo, mientras que para K = 0.01J, sólo se necesitan 80 momentos magnéticos y para K = 0.1J, 40 momentos magnéticos son suficientes para la formación de un primer solitón.

Las simulaciones de Monte Carlo han sido diseñadas para encontrar el promedio estadístico explorando el perfil de energía interna. A bajas temperaturas y para sistemas grandes, sin embargo, la escala de tiempo de la simulación es mucho más pequeña que los tiempos de correlación como se mostró recientemente en la referencia [Vedmedenko et al., 2011]. Por lo tanto, cuando los sistemas están en uno de los estados helicoidales, estos permanecen en ese estado un largo tiempo en la simulación. Debido al promedio insuficiente y a los largos tiempos de vida de los estados excitados, ~ 10 ms, sólo observamos los mínimos locales más profundos, esto es, con el menor número de solitónes en las simulaciones en Monte Carlo. Debido a la fuerte anisotropía de forma, los estados no colineales se encuentran con mayor facilidad para altos valores de anisotropía debido a que los mínimos locales son más profundos. Esto tiene una buena concordancia con los resultados analíticos previos. Además, permite explicar la existencia de paredes de dominio antiferromagnéticas en nanomagnetos.

5.4. Conclusiones

En resumen, mostramos analíticamente que las cadenas cerradas acopladas mediante interacciones de intercambio antiferromagnéticas, interacción dipolar y sujetas a una anisotropía magnética perpendicular al plano del anillo poseen mínimos locales de energía correspondiente a los estados magnéticos no colineales tales como las hélices magnéticas. Con el incremento de la anisotropía, los solitónes serán energéticamente más favorables que las hélices magnéticas. Debido a los largos tiempo de vida de estos estados, más solitones pueden existir en estas estructuras cerradas. Por esta razón las configuraciones antiferromagnéticas del tipo solitón pueden ser encontradas en cadenas cerradas con un número par de momentos magnéticos. Los estados no colineales pueden ser encontrados en cualquier geometría cerrada unidimensional.

Los resultados de este trabajo forman parte del articulo "Magnetic Möbius stripe without frustration: noncollinear metastable states", de los autores S. Castillo-Sepúlveda, R. A. Escobar, D. Altbir, M. Krizanac, y E. Y. Vedmedenko, enviado a la revista Physical Review B [Castillo-Sepúlveda et al., 2016].

Capítulo 6

Conclusiones generales

En esta tesis se han abordado tres problemas asociados al comportamiento magnético de estructuras. Mediante cálculos numéricos pudimos comprender el comportamiento de diferentes estructuras, de tamaño nanométrico y molecular. En particular, en nanopartículas con geometría con forma de estadio, obtuvimos los modos de reversión, pudiendo identificar tres tipos diferentes de modos. A tamaños pequeños obtuvimos que la magnetización revierte mediante la formación de un vórtice aislado que se propaga perpendicular al campo aplicado. Al aumentar el tamaño del estadio (el parámetro *S*), encontramos un proceso de reversión conducido por la nucleación y propagación de dos vórtices, que contienen una pared de tipo diamante entre ellos. Finalmente, en los estadios de mayor tamaño, encontramos un proceso conducido por la nucleación y propagación de dos vórtices, con un antivórtice entre ellos. También encontramos una relación entre las direcciones de propagación de los vórtices, y la aparición de la pared tipo diamante o el antivórtice, mostrando la riqueza que tienen estos sistemas.

También estudiamos anillos magnéticos de tamaño pequeño, menor a 100 nm. En ellos pudimos observar, a diferencia de los dos modos (vórtice y no vórtice) usualmente reportados, cuatro modos de reversión (LV, DWV, T, DW). Dos de estos modos contienen en alguna etapa del proceso de reversión, un vórtice que involucra a todo el anillo, y dos modos no contienen un vórtice en ningún momento de la reversión. Los cuatro modos no son identificables a partir de sus correspondientes curvas de histéresis, pero son fácilmente reconocibles a partir de sus curvas de susceptibilidad, sin necesidad de realizar múltiples ciclos de histéreses, como es el caso del análisis de curvas FORC. Estas muestran características particulares que pueden asociarse a cada modo indiscutiblemente, ya que es posible diferenciar las diferentes etapas de una reversión y su estabilidad (en términos del campo aplicado a través de los máximos en la susceptibilidad. De esta forma, el análisis de los máximos y de la forma de las curvas de susceptibilidad puede convertirse en una buena herramienta para la identificación de diferentes modos de reversión en anillos de tamaño pequeño. Finalmente estudiamos, mediante cálculos analíticos y numéricos, cadenas lineales cerradas con interacción de intercambio antiferromagnética. En estos sistemas consideramos también interacciones dipolares y anisotropías, y obtuvimos el comportamiento general de los momentos magnéticos atómicos, observando estados tipo hélice y solitones. Observamos que a medida que aumenta la anisotropía, disminuye el tamaño del solitón. Estos solitones son comparables a los encontrados por E.Y. Vedmedenko en [Vedmedenko and Altwein, 2014] donde, utilizando cálculos numéricos similares, se observaron estos solitones en cadenas magnéticas.

De esta forma pudimos obtener el comportamiento de tres sistemas magnéticos que pueden ser de interés básico pero que también pueden tener uso en diferentes tecnologías asociadas a espintrónica.

Referencias Bibliográficas

- Abraham, M. C., Schmidt, H., Savas, T. A., Smith, H. I., Ross, C. A., and Ram, R. J. (2001). Magnetic properties and interactions of single-domain nanomagnets in a periodic array. *Journal of Applied Physics*, 59(5667).
- Baibich, M. N., Broto, J. M., Fert, A., Dau, F. N. V., Petroff, F., Etienne, P., Creuzet, G., Friederich, A., and Chazelas, J. (1988). Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 61(2472).
- Behin-Aein, B., Datta, D., Salahuddin, S., and Datta, S. (2010). Proposal for an all-spin logic device with built-in memory. *Nature Nanotechnology*, 5(266).
- Bernot, K., Bogani, L., Caneschi, A., Gatteschi, D., and Sessoli, R. (2006). A family of rareearth-based single chain magnets: playing with anisotropy. *Journal of the American Chemical Society*, 128(7947).
- Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., and Zinn, W. (1989). Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, 39(4828).
- Binder, K. and Heermann, D. (2002). *Monte carlo simulation in statistical physics*. Springer, New York.
- Bode, M., Wachowiak, A., Wiebe, J., Kubetzka, A., Morgenstern, M., and Wiesendanger, R. (2004). Thickness dependent magnetization states of Fe islands on W(100): From single domain to vortex and diamonds patterns. *Applied Physics Letters*, 84(6).
- Buchanan, K. S., Roy, P. E., Fradin, F. Y., Guslienko, K. Y., Grimsditch, M., Bader, S. D., and Novosad, V. (2006). Vortex dynamics in patterned ferromagnetic ellipses. *Journal of Applied Physics*, 99(08C707).
- Buchanan, K. S., Roy, P. E., Grimsditch, M., Fradin, F. Y., Guslienko, K. Y., Bader, S. D., and Novosad, V. (2005). Soliton-pair dynamics in patterned ferromagnetic ellipses. *Nature Physics*, 1(172).

- Cador, O., Gatteschi, D., Sessoli, R., Barra, A.-L., Timcoc, G. A., and Winpennye, R. E. P. (2005). Spin frustration effects in an odd-member antiferromagnetic ring and the magnetic Möbius strip. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 290(55).
- Castaño, F. J., Ross, C. A., Frandsen, C., Eilez, A., Gil, D., Smith, H. I., Redjdal, M., and Humphrey, F. B. (2003). Metastable states in magnetic nanorings. *Physical Review B*, 67(184425).
- Castillo-Sepúlveda, S., Escobar, R. A., Altbir, D., Krizanac, M., and Vedmedenko, E. Y. (2016). Magnetic Möbius stripe without frustration: noncollinear metastable states. *Physical Review B (ENVIADO)*.
- Castillo-Sepúlveda, S., Vargas, N. M., Altbir, D., and Allende, S. (2012). Mechanisms of magnetization reversal in stadium-shaped particles. *Journal of Applied Physics*, 112(083906).
- Castillo-Sepúlveda, S., Vargas, N. M., Escobar, R. A., Baltazar, S. E., Allende, S., and Altbir, D. (2014). Reversal modes in small rings: signature on the susceptibility. *Journal of Applied Physics*, 115(223903).
- Chapman, J. N., Aitchison, P. R., Kirk, K. J., McVitie, S., Kools, J. C. S., and Gillies, M. F. (1998). Direct observation of magnetization reversal processes in micron-sized elements of spin-valve. *Journal of Applied Physics*, 83(5321).
- Choe, S.-B., Acremann, Y., Scholl, A., Bauer, A., Doran, A., Stöhr, J., and Padmore, H. A. (2004). Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science*, 304(420).
- Chou, K. W., Puzic, A., Stoll, H., Dolgos, D., Schütz, G., Waeyenberge, B. V., Vansteenkiste, A., Tyliszczak, T., Woltersdorf, G., and Back, C. H. (2007). Direct observation of the vortex core magnetization and its dynamics. *Applied Physics Letters*, 90(202505).
- Coey, J. M. D. (2010). *Magnetism and magnetic materials*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Compton, R. L. and Crowell, P. A. (2006). Dynamics of a pinned magnetic vortex. *Physical Review Letters*, 97(137202).
- Cowburn, R. P., Koltsov, D. K., Adeyeye, A. O., Welland, M. E., and Tricker, D. M. (1999). Single-domain circular nanomagnets. *Physical Review Letters*, 83(1042).
- Dahlberg, E. D. (2011). Private communication.
- d'Albuquerque e Castro, J., Altbir, D., Retamal, J. C., and Vargas, P. (2002). Scaling approach to the magnetic phase diagram of nanosized systems. *Physical Review Letters*, 88(237202).

- Drews, A., Krüger, B., Meier, G., Bohlens, S., Bocklage, L., Matsuyama, T., and Bolte, M. (2009). Current- and field-driven magnetic antivortices for nonvolatile data storage. *Applied Physics Letters*, 94(062504).
- Durr, H. A., van der Lann, G., Vogel, J., Finazzi, M., and Goedkoop, J. B. (1998). Interface orbital moment anisotropy in CoPd multilayers. *IEEE Transactions on Magnetics*, 34(4).
- Eames, P. (2004). PhD thesis, University of Minnesota.
- Fernández-Pacheco, A., Petit, D., Mansell, R., Lavrijsen, R., Lee, J. H., and Cowburn, R. P. (2012). Controllable nucleation and propagation of topological magnetic solitons in CoFeB/Ru ferrimagnetic superlattices. *Physical Review B*, 86(104422).
- Friedman, J. R., Sarachik, M. P., Tejada, J., and Ziolo, R. (1996). Macroscopic measurement of resonant magnetization tunneling in high-spin molecules. *Physical Review Letters*, 76(20).
- Fruchart, O., Nozières, J. P., Wernsdorfer, W., Givord, D., Rousseaux, F., and Decanini, D. (1999). Enhanced coercivity in submicrometer-sized ultrathin epitaxial dots with in-plane magnetization. *Physical Review Letters*, 82(1305).
- Gaididei, Y., Volkov, O. M., Kravchuk, V. P., and Sheka, D. D. (2012). Magnetic vortex-antivortex crystals generated by spin-polarized current. *Physical Review B*, 86(144401).
- García-Martín, J. M., Thiaville, A., Miltat, J., Okuno, T., Vila, L., and Piraux, L. (2004). Imaging magnetic vortices by magnetic force microscopy: experiments and modelling. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 37(965).
- Gerrits, T., van den Berg, H. A. M., Hohlfeld, J., Bar, L., and Rasing, T. (2002). Ultrafast precessional magnetization reversal by picosecond field pulse shaping. *Nature*, 418(509).
- Gliga, S., Yan, M., Hertel, R., and Schneider, C. M. (2008). Ultrafast dynamics of a magnetic antivortex: Micromagnetic simulations. *Physical Review B*, 77(060404).
- Hankemeier, S., Frömter, R., Mikuszeit, N., Stickler, D., Stillrich, H., Pütter, S., Vedmedenko, E. Y., and Oepen, H. P. (2009). Magnetic ground state of single and coupled permalloy rectangles. *Physical Review Letters*, 103(147204).
- Haque, M., Chandra, V. R., and Bandyopadhyay, J. N. (2009). Entanglement and level crossings in frustrated ferromagnetic rings. *Physical Review A*, 79(042317).
- He, K., Smith, D. J., and McCartney, M. R. (2010). Effects of vortex chirality and shape anisotropy on magnetization reversal of Co nanorings. *Journal of Applied Physics*, 107(09D307).

- Heyderman, L. J., Kläui, M., Schäublin, R., Rüdiger, U., Vaz, C. A. F., Bland, J. A. C., and David, C. (2005). Fabrication of magnetic ring structures for lorentz electron microscopy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 290(86).
- Huang, X., Li, L., Luo, X., Zhu, X., and Li, G. (2008). Orientation-controlled synthesis and ferromagnetism of single crystalline Co nanowire arrays. *Journal of Physical Chemistry C*, 112(1468).
- Hwang, M. H., Abraham, M. C., Savas, T., Smith, H. I., Jam, R. J., and Ross, C. A. (2000). Magnetic force microscopy study of interactions in 100 nm period nanomagnet arrays. *Journal of Applied Physics*, 87(5108).
- Kammerer, M., Weigand, M., Curcic, M., Noske, M., Sproll, M., Vansteenkiste, A., Waeyenberge, B. V., Stoll, H., Woltersdorf, G., Back, C. H., and Schütz, G. (2011). Magnetic vortex core reversal by excitation of spin waves. *Nature Communication*, 2(279).
- Kimura, T., Otani, Y., and Hamrle, J. (2005). Determination of magnetic vortex chirality using lateral spin-valve geometry. *Applied Physics Letters*, 87(172506).
- Klaüi, M., Vaz, C. A. F., Bland, J. A. C., Monchesky, T. L., Unguris, J., Bauer, E., Cherifi, S., Heun, S., Locatelli, A., Heyderman, L. J., and Cui, Z. (2003). Direct observation of spin configurations and classification of switching processes in mesoscopic ferromagnetic rings. *Physical Review B*, 68(134426).
- Lavrijsen, R., Lee, J. H., Fernández-Pacheco, A., Petit, D., Mansell, R., and Cowburn, R. P. (2013). Magnetic ratchet for three-dimensional spintronic memory and logic. *Nature*, 493(647).
- Lebib, A., Li, S. P., Natali, M., and Chen, Y. (2001). Size and thickness dependencies of magnetization reversal in Co dot arrays. *Journal of Applied Physics*, 89(3892).
- M. Grimsditch, Y. J. and Schuller, I. K. (1998). Magnetic anisotropies in dot arrays: shape anisotropy versus coupling. *Physical Review B*, 58(11539).
- Mejía-López, J., Altbir, D., Landeros, P., Escrig, J., Romero, A. H., Roshchin, I. V., Li, C.-P., Fitzsimmons, M. R., Battle, X., and Schuller, I. K. (2010). Development of vortex state in circular magnetic nanodots: theory and experiment. *Physical Review B*, 81(184417).
- Mejía-López, J., Altbir, D., Romero, A. H., Battle, X., Roshchin, I. V., Li, C.-P., and Schuller, I. K. (2006). Vortex state and effect of anisotropy in sub-100-nm magnetic nanodots. *Journal of Applied Physics*, 100(104319).
- Mejía-López, J., Soto, P., and Altbir, D. (2005). Asymmetric reversal of the hysteresis loop in exchange-biased nanodots. *Physical Review B*, 71(104422).

- Milinska, E. and Wawro, A. (2014). Influence of shape, size and internal structure on magnetic properties of core-edge nanodots with perpendicular anisotropy. *Journal of Applied Physics*, 116(193905).
- Morgan, J. P., Stein, A., Langridge, S., and Marrows, C. H. (2011). Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice. *Nature Physics*, 7(75).
- Oyarce, A. L. G., Trypiniotis, T. T., Roy, P. E., and Barnes, C. H. W. (2013). Topologicalcharge-driven reversal of ferromagnetic rings via 360° domain-wall formation. *Physical Review B*, 87(174408).
- Parkin, S. S. P., Hayashi, M., and Thomas, L. (2008). Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873).
- Petit, D., Lavrijsen, R., Lee, J. H., Mansell, R., Fernández-Pacheco, A., and Cowburn, R. P. (2016). Systematic layer-by-layer characterization of multilayers for three-dimensional data storage and logic. *Nanotechnology*, 27(155203).
- Popov, A. P., Rettori, A., and Pini, M. G. (2015). Spectrum of noncollinear metastable configurations of a finite-size discrete planar spin chain with a collinear ferromagnetic ground state. *Physical Review B*, 92(024414).
- Prinz, G. A. (1999). Magnetoelectronics applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 200(57).
- Ren, Y., Singh, N., , and Adeyeye, A. O. (2013). The angular dependence of magnetization reversal in coupled elongated $Ni_{80}Fe_{20}$ nanorings. *Journal of Applied Physics*, 113(17A335).
- Rivas, J., Bantu, A. K. M., Zaragoza, G., Blanco, M. C., and López-Quintela, M. A. (2002). Preparation and magnetic behavior of arrays of electrodeposited Co nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 249(220).
- Ross, C. A. (2001). Patterned magnetic recording media. *Annual Review of Materials Research*, 31(203).
- Sandratskii, L. M. (1991). Symmetry analysis of electronic states for crystals with spiral magnetic order. II. connection with limiting cases. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 3(8565).
- Schumann, A., Szary, P., Vedmedenko, E. Y., and Zabe, H. (2012). Magnetic dipole configurations in honeycomb lattices: order and disorder. *New Journal of Physics*, 14(035015).

- Shigeto, K., Okuno, T., Mibu, K., Shinjo, T., and Ono, T. (2002). Magnetic force microscopy observation of antivortex core with perpendicular magnetization in patterned thin film of permalloy. *Applied Physics Letters*, 80(4190).
- Shinjo, T., Okuno, T., Hassdorf, R., Shigeto, K., and Ono, T. (2000). Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy. *Science*, 289(930).
- Sun, S., Murray, C. B., Weller, D., Folks, L., and Moser, A. (2000). Monodisperse FePt nanoparticles and ferromagnetic FePt nanocrystal superlattices. *Science*, 92(2989).
- Telepinsky, Y., Sinwani, O., Mor, V., Schultz, M., and Klein, L. (2016). Magnetic thermal stability of permalloy microstructures with shape-induced bi-axial anisotropy. *Journal of Applied Physics*, 119(083902).
- Vargas, P., Altbir, D., and d'Albuquerque e Castro, J. (2006). Fast monte carlo method for magnetic nanoparticles. *Physical Review B*, 73(092417).
- Vavassori, P., Zaluzec, N., Metlushko, V., Novosad, V., Ilic, B., and Grimsditch, M. (2004). Magnetization reversal via single and double vortex states in submicron permalloy ellipses. *Physical Review B*, 69(214404).
- Vaz, C. A. F., Kläui, M., Lopez-Diaz, L., Rothman, J., Bleloch, A., Cui, Z., Speaks, R., and Bland, J. A. C. (2002). Mesoscopic FCC Co ring magnets. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 249(208).
- Vedmedenko, E. Y. and Altwein, D. (2014). Topologically protected magnetic helix for allspin-based applications. *Physical Review Letters*, 112(017206).
- Vedmedenko, E. Y., Mikuszeit, N., Stapelfeldt, T., Wieser, R., Potthoff, M., Lichtenstein, A. I., and Wiesendanger, R. (2011). Spin-spin correlations in ferromagnetic nanosystems. *European Physical Journal B*, 80(331).
- Wachowiak, A., Wiebe, J., Bode, M., Pietzsch, O., Morgenstern, M., and Wiesendanger, R. (2002). Direct observation of internal spin structure of magnetic vortex cores. *Science*, 298(577).
- Waeyenberge, B. V., Puzic, A., Stoll, H., Chou, K. W., Tyliszczak, T., Hertel, R., Fähnle, M., Brückl, H., Rott, K., Reiss, G., Neudecker, I., Weiss, D., Back, C., and Schütz, G. (2006). Magnetic vortex core reversal by excitation with short bursts of an alternating field. *Nature*, 444(461).

Wernsdorfer, W. (2007). Molecular magnets: a long-lasting phase. *Nature Materials*, 6(174).

Yu, J., Rüdiger, U., Thomas, L., Parkin, S. S. P., and Kent, A. D. (1999). Micromagnetics of mesoscopic epitaxial (110) Fe elements with nanoshaped ends. *Journal of Applied Physics*, 85(5501).

- Zhou, L., Wiebe, J., Lounis, S., Vedmedenko, E. Y., Meier, F., Blügel, S., Dederichs, P. H., and Wiesendanger, R. (2010). Strength and directionality of surface Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida interaction mapped on the atomic scale. *Nature Physics*, 6(187).
- Zhu, J.-G., Zheng, Y., and Prinz, G. A. (2000). Ultrahigh density vertical magnetoresistive random access memory. *Journal of Applied Physics*, 87(6668).

Apéndice A

Cálculo de energía en cadenas cerradas.

A continuación, detallamos los cálculos de la energía de las configuraciones magnéticas tipo hélice y solitón.

A.1. Configuración tipo hélice magnética.

Consideremos una cadena cerrada que contiene N momentos magnéticos que forman una hélice (AFSS). Una parametrización de los momentos que define un ordenamiento helicoidal es

$$\mathbf{m}(r) = (\sin(\Delta\theta r), 0, \cos(\Delta\theta r)), \tag{A.1}$$

donde r es la coordenada espacial de cada momento. Notemos que debido a la periodicidad $\mathbf{m}(1) = \mathbf{m}(N+1)$, se tiene que $N\Delta\theta = 2\pi q$. Si N es par, entonces existe un q tal que $\Delta\theta = \pi$. En efecto, consideremos P < N tal que N = 2P, entonces, $\Delta\theta = \pi(q/P)$. Como P < N, podemos escoger q = P. En este caso, vemos que la hélice magnética coincide con el estado antiferromagnético (AFM). Si N es impar, $2q/P \neq 1$, por lo que no podemos alcanzar la configuración antiferromagnética. Desde un punto de vista energético, tenemos que

$$E(\Delta\theta) = \mathcal{J}m^2 \sum_{r=0}^{N-1} \mathbf{m}(r) \cdot \mathbf{m}(r+1) - Km^2 \sum_{r=0}^{N-1} m_z^2(r)$$
$$= \mathcal{J}m^2 N \cos(\Delta\theta) - Km^2 \sum_{r=1}^{N} \cos^2(r\Delta\theta),$$

con $J = -\mathcal{J}$. Si minimizamos la energía anterior con respecto a $\Delta \theta$, obtenemos que

$$\frac{dE}{d\Delta\theta}(\Delta\theta) = -\mathcal{J}m^2N\sin(\Delta\theta) + 2Km^2\sum_{r=0}^N r\cos(\Delta\theta r)\sin(\Delta\theta r) = 0,$$

donde el tipo de solución depende directamente de N. Si N es par, entonces la solución es $\Delta \theta = \pi$, mientras que si N es impar, la solución es $\Delta \theta = \pi (1 \pm 1/N)$. En base a lo anterior, la energía de una cadena cerrada

$$E(N) = \begin{cases} -m^2 N (\mathcal{J} + K) & N \text{ par} \\ -\mathcal{J} m^2 N \cos(\pi/N) - K m^2 \sum_{r=0}^{N-1} \cos^2(\pi r/N) & N \text{ impar} \end{cases}.$$
 (A.2)

Vemos pues que, cuando N es par, tenemos una configuración de la magnetización tipo AFM, mientras que si N es impar, tenemos una configuración tipo hélice magnética. La figura 5.2 muestra las energías para distintos valores de N.

A.2. Configuración tipo solitón.

Consideremos un sistema de N momentos magnéticos, en el cual M momentos magnéticos forman una región tipo hélice magnética y N - M momentos magnéticos definen una región antiferromagnética. Este estado se puede entender como una hélice magnética no homogénea, es decir, un solitón. Podemos considerar entonces que

$$E = E(AFM) + E(AFSS),$$

donde E(AFSS) ya fue calculado en la sección anterior, y depende de $\Delta\theta$, que se considerara igual para cada par de momentos magnéticos vecinos que forman el solitón.

A.2.1. N par, M par

En este caso tenemos que N - M es par. De esta forma, si el primer momento de la región antiferromagnética es \downarrow , entonces el último es \uparrow . La energía de esta región es

$$E(AFM) = -\mathcal{J}m^2(N-M-1) - Km^2(N-M).$$

Consideremos la región tipo hélice magnética que inicia con un momento magnético ↑. En esta configuracióm el último momento de la región antiferromagnética está ordenado en la misma dirección. Luego, la energía de esta región es

$$E(\text{AFSS}) = \mathcal{J}m^2 M \cos(\Delta\theta) - Km^2 \sum_{r=0}^{M-1} \cos^2(\Delta\theta r),$$

con $M\Delta\theta = 2\pi q$. Finalmente, el primer momento de la región tipo hélice magnética y el primer momento de la región antiferromagnética tienen una interacción dada por $-\mathcal{J}m^2$, lo que da

$$E = -\mathcal{J}m^2(N-M) - Km^2(N-M) - \mathcal{J}m^2M\cos(\Delta\theta) - Km^2\sum_{r=0}^M\cos^2(\Delta\theta r).$$

Hemos visto que la energía *E* es mínima cuando $\Delta \theta = \pi$. La configuración obtenida en este caso coincide con la configuración antiferromagnética, es decir

$$E = -Nm^2(\mathcal{J} + K).$$

A.2.1.1. *N* par, *M* impar

En este caso tenemos que N-M es impar. De esta forma, si el primer momento de la región antiferromagnética es \downarrow , entonces el último es \downarrow . La energía de esta región es

$$E(AF) = -\mathcal{J}m^2(N-M-1) - Km^2(N-M).$$

Podemos considerar ahora la región tipo hélice magnética que inicia con un momento magnético ↑. El último momento de la región antiferromagnética está ordenado en la misma dirección. Luego, la energía de esta región es

$$E(\text{AFSS}) = \mathcal{J}m^2 M \cos(\bar{\Delta\theta}) - Km^2 \sum_{r=0}^{M-1} \cos^2(\bar{\Delta\theta}r),$$

con $M\overline{\Delta\theta} = 2\pi q - \pi$. Finalmente, el primer momento de la región tipo hélice magnética y el primer momento de la región antiferromagnética tienen una interacción dada por $-\mathcal{J}m^2$, lo que da

$$E = -\mathcal{J}m^2(N-M) - Km^2(N-M) - \mathcal{J}m^2M\cos(\bar{\Delta\theta}) - Km^2\sum_{r=0}^{M-1}\cos^2(\bar{\Delta\theta}r).$$

La energía anterior se minimiza si $\overline{\Delta \theta} = \pi$, luego, tenemos nuevamente la configuración antiferromagnética.

A.2.2. N impar, M impar

En este caso tenemos que N - M es par. De esta forma, si el primer momento de la región antiferromagnética es \downarrow , entonces el ultimo es \uparrow . La energía de esta región es

$$E(AFM) = -\mathcal{J}m^2(N-M-1) - Km^2(N-M).$$

Podemos considerar ahora la región tipo hélice magnética que inicia con un momento magnético \uparrow . El último momento de la región antiferromagnética está ordenado en la misma dirección. Luego, la energía de esta región es

$$E(AFSS) = -\mathcal{J}m^2 M \cos(\pi/M) - Km^2 \sum_{r=0}^{M-1} \cos^2(\pi r/M).$$

De esta forma, la energía total es

$$E = -\mathcal{J}m^2(N-M) - Km^2(N-M) - \mathcal{J}m^2M\cos(\pi/M) - Km^2\sum_{r=0}^{M-1}\cos^2(\pi r/M).$$

Si comparamos esta energía con la de la configuración tipo hélice magnética de un anillo con N impar, tenemos que

$$\Delta E = -\mathcal{J}m^2 N \cos(\pi/N) - Km^2 \sum_{r=0}^{N-1} \cos^2(\pi r/N) + \mathcal{J}m^2(N-M) + Km^2(N-M) + Km^2(N-M) + \mathcal{J}m^2 M \cos(\pi/M) + Km^2 \sum_{r=0}^{M-1} \cos^2(\pi r/M) = \mathcal{J}m^2(N(1-\cos(\pi/N)) - M(1-\cos(\pi/M))) - M(1-\cos(\pi/M))) - Km^2 \left(\sum_{r=0}^{N-1} \cos^2(\pi r/N) - \sum_{r=0}^{M-1} \cos^2(\pi r/M)\right) + Km^2(N-M).$$
(A.3)

Si definimos la función D(x) como

$$D(x) = \mathcal{J}m^2 x (1 - \cos(\pi/x)) - Km^2 \sum_{r=0}^x \cos^2(\pi/rx) + Km^2 x,$$
 (A.4)

tenemos que la diferencia de energia ΔE se puede escribir como

$$\Delta E = D(N) - D(M).$$

Si $\Delta E > 0$, la configuración tipo solitón tiene minima energía, mientras que si $\Delta E < 0$, la configuración tipo hélice magnética minimiza la energía. La figura 5.3(a) muestra el comportamiento de ΔE cuando J = 1 para N = 31, mientras que el comportamiento de M en función de K es el mismo para todo N, como se ilustra en la figura 5.3(b).