

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LOS NANOHILOS DE NÍQUEL

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

SEBASTIÁN EDUARDO ALLENDE PRIETO

Profesor Guía: Dra. Dora Altbir Drullinsky
Profesor Co-Guía: Dra. Mónica Bahiana

SANTIAGO – CHILE
Agosto 2008

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LOS
NANOHILOS DE NÍQUEL**

SEBASTIÁN EDUARDO ALLENDE PRIETO

Profesor Guía: Dra. Dora Altbir Drullinsky

Profesor Co-Guía: Dra. Mónica Bahiana

Profesores Comisión: Dr. Juliano Casagrande Denardin

Dr. Justo López Sarrion

Dr. Enrique Cerda Villablanca

Dr. Álvaro Núñez Vásquez

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

SANTIAGO DE CHILE
AGOSTO 2008

“PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LOS NANOHILOS DE NÍQUEL”

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

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE

**SANTIAGO DE CHILE
AGOSTO 2008**

Propiedades magnéticas de los nanohilos de Níquel

Sebastián Eduardo Allende Prieto



Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en
Ciencias con Mención en Física

Universidad de Santiago de Chile
Facultad de Ciencias
Departamento de Física

Dedicado a

Mis padres y hermano.

Propiedades Magnéticas de los nanohilos de Níquel

Sebastián Eduardo Allende Prieto

Tesis enviada para obtener el grado de Doctor en Ciencias con
Mención en Física
USACH, Santiago, Agosto 2008

Resumen

En los últimos años una gran atención se ha focalizado en el estudio de arreglos regulares de partículas magnéticas con dimensiones del orden de los nanómetros. Este interés ha sido gatillado por las potenciales aplicaciones de estas partículas en dispositivos de memorias magnéticas no volátiles o sensores de campo magnético de alta resolución [1]. Arreglos de elementos magnéticos discretos como hilos, anillos o puntos, han sido propuestos como una nueva generación de medio de grabación de ultra alta densidad [2]. Resultados experimentales y teóricos recientes han mostrado que hay diversos factores que influyen en el comportamiento magnético de estos arreglos, tales como la geometría, anisotropía y las interacciones magnéticas entre partículas. El efecto de estos factores debe ser entendido previo a poder utilizar estos sistemas e nuevos dispositivos.

El foco de esta tesis es el estudio de las propiedades magnéticas de nanohilos de níquel. Nuestro trabajo se realizó utilizando simulaciones Monte Carlo combinadas con una técnica de escalamiento, conocida con el nombre de Fast Monte Carlo [3], la cual permite reducir el número de átomos considerados en nuestro sistema, permitiendo considerar la interacción dipolar en

detalle con los recursos computacionales que se disponen hoy en día.

Esta tesis se enfoca principalmente en tres tópicos: Modos de reversión en arreglos de nanohilos magnéticos de níquel interactuantes, propagación de paredes de dominios transversales en un nanohilo magnético homogéneo y modos de reversión en nanotubos. En el primero de estos temas estudiamos el efecto de la interacción dipolar en una celda hexagonal con siete hilos (uno en el centro), enfocándonos en el comportamiento del hilo central. En este sistema observamos un máximo en la curva de coercividad en función de la distancia entre los hilos, el cual corresponde a un modo de reversión particular de los hilos determinado principalmente por la interacción dipolar entre ellos.

También estudiamos la nucleación y propagación de paredes de dominios transversales en un nanohilo homogéneo. En estos sistemas encontramos distintos regimenes para la velocidad de propagación en función del campo aplicado. Luego de un régimen lineal dominante a campos bajos, aparece una relación no lineal entre la velocidad de propagación de la pared de dominio y el campo magnético externo, seguido por nucleaciones simultaneas de varias paredes de dominio para campo altos. En este tema también estudiamos la propagación de una pared de dominio en función del ángulo del campo magnético externo respecto del eje del hilo. Al respecto se observó que para un ángulo cercano a 45° , la velocidad de reversión de la magnetización es mayor que si el ángulo es cercano a 0° o 90° . Este aumento en la velocidad está definido por la existencia de una combinación óptima entre las tres etapas que conforman la reversión magnética: Etapa de redireccionamiento (etapa en la que los momentos magnéticos se orientan en una dirección definida por el eje del hilo y la dirección del campo magnético), etapa de nucleación (etapa en la cual se forma la pared de dominio) y la etapa de propagación (etapa en la cual la a pared de dominio se propaga a lo largo

del hilo).

Finalmente estudiamos la reversión en nanotubos magnéticos como función de la geometría, encontrando que existen fundamentalmente dos tipos de reversión, mediante la propagación de paredes de dominio transversal o tipo vortices. Estos mecanismos se manifiestan en función del radio interno y externo del nanotubo y parámetros que definen el material [6].

Nuestros estudios numéricos han sido contrastados con resultados experimentales, mostrando que la técnica utilizada permite describir adecuadamente hilos y tubos magnéticos.

Agradecimientos

Ya no se cuanto tiempo he estado frente al computador para escribir esta primera línea, talvez para algunos sin sentido. Tantas personas que agradecer que ya perdí la cuenta y si describiera a cada uno lo importante que ha sido para mi, creo que no terminaría nunca. Antes de comenzar a agradecer, a cada nombre le antepongo un gracias, sin chistes, sin comentarios, sin grados, pues en ocasiones decir un gracias vale mas que mil palabras si sale de verdad de adentro.

Primeramente quiero de verdad agradecer a la profesora Dora Altbir, por el incondicional apoyo y paciencia (de verdad hay que tenerla) hacia mi persona para ayudarme a salir hacia delante en este nuevo mundo que se me avecina. Simplemente ha sido un pilar fundamental en mi formación como científico. También otra persona que ha jugado un papel fundamental en mi formación ha sido la profesora Monica Bahiana, que creo que sin ellas dos no estaría escribiendo estas línea ahora, a si de simple. De verdad a las dos, Muchas Gracias por todo.

Una parte importante de mi formación también han sido los profesores que con el tiempo pasan a ser amigos que me han enseñado o han dado parte de su tiempo para darme consejos en momentos que verdaderamente lo he necesitado, de verdad: gracias Juan Carlos Retamal, gracias Enrique Cerda, gracias Jorge Gamboa, gracias Francisco Melo, gracias Jaime Caballero,

gracias Juliano Denardin, gracias Mikhail Pliouchtchai, gracias José Mejía López, gracias Mónica Pacheco, gracias Iaroslav Ispolatov, gracias Rubén Pastene, gracias Patricio Vargas, gracias Roberto Bernal, gracias Fernando Mendez, gracias Eugenio Vogel, gracias Luis Rodríguez, gracias Jean Jacques Amman, gracias Alvaro San Martín, gracias Rolando Blest, entre otros.

También quiero agradecer a mis compañeros y amigos que en un comienzo me han ayudado de una forma u otras en mi formación, tanto como persona o como formación científica. De verdad son importantes para mí, gracias Evy Salcedo, gracias Benjamín Toledo, gracias Juan Escrig, gracias Pedro Landeros, gracias Alvaro Nuñez, gracias Guillermo Romero, gracias Paul Soto, gracias Javier Contreras, gracias Carlos López, gracias Justo López, gracias Francisco Vivanco, gracias Roberto Lavin y gracias Freddy Lastra. De verdad muchas gracias.

Quiero agradecer también a Paola Arias, Mauricio Valenzuela, Verónica Calderón, Jessica Brizuela, Bethsaida Mezzano, Francisco Correa, Victor Romero, Rafael, Octavio, Alejandro Pereira, Bertha Cuadros, Antonella Rescaglio, Daniela Soto, Felipe Amaral, Sra. Susana, Emelina Bronte, Erika, Roxana, Leonor, don Pedro, Cesar, entre otros. Además quiero agradecer a mis nuevos compañeros de oficina y amigos que recién entran en el programa de Doctorado por su apoyo, les deseo lo mejor a Juan Luís Palma y Sebastián Michea.

También quiero agradecer a las instituciones que han estado jugando un papel fundamental en la formación de nuevos científicos, la cuales con sus programa de becas fomentan e incentivan la investigación científica. La primera institución que se la ha jugado por mí de forma económica es la Comisión Nacional Científica y Tecnológica (CONICYT) mediante sus becas de postgrado. También quiero agradecer a la Universidad de Santiago de Chile (USACH) por darme la oportunidad de poder formarme como científico en

esa casa de estudios, en especial a la Dirección de Graduados de la Universidad de Santiago de Chile. Además quiero agradecer a dos núcleos milenios, uno es el “Núcleo Milenio Física de la Materia Condensada” y el otro es el “Núcleo Milenio Magnetismo Básico y Aplicado”, ambos han dado su apoyo económico para mi formación científica. Por último quiero agradecer a la Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) por su hospitalidad.

Mamá, Papá y Esteban, de verdad, los amo. No tengo más palabras. Gracias por todo.

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	VI
1. Introducción	1
1.1. Aspectos generales	1
1.2. Discos rígidos Magnéticos	4
1.2.1. Límite Superparamagnético	5
1.2.2. Arreglo de nanohilos magnéticos	7
1.3. Arquitecturas lógicas de paredes de dominio magnético	9
2. Fundamentos teóricos	12
2.1. Conceptos básicos	12
2.2. Clasificación de los materiales magnéticos	13
2.3. Curva de histéresis	17
2.4. Principales energías involucradas en un sistema magnético	19
2.4.1. Interacción de Intercambio	20
2.4.2. Interacción de Zeeman	21
2.4.3. Interacciones anisotrópicas	22
2.4.4. Energía dipolar	25
2.5. Dominios Ferromagnéticos	26

2.6. Fast Montecarlo	30
2.6.1. Importancia	30
2.6.2. Técnica de escalamiento de un diagrama de fase magnético	31
2.6.3. Fast Montecarlo	32
3. Modos de reversión en arreglos de nanohilos magnéticos de Níquel	35
3.1. Introducción	35
3.2. Modelo	38
3.3. Resultados y Discusión	41
3.4. Conclusión	48
4. Propagación de una pared de dominio transversal en un nanohilo homogéneo de Níquel.	50
4.1. Introducción	50
4.2. Modelo	53
4.3. Resultados y discusión	54
4.3.1. Propagación a $\theta_B = 0^\circ$	58
4.3.2. Propagación con $\theta_B \neq 0^\circ$	63
4.4. Conclusión	65
5. Reversión magnética en nanotubos.	69
5.1. Introducción	69
5.2. Modelo	70
5.3. Resultados y discusión	72
5.4. Conclusiones	75
6. Conclusiones	77

<i>Índice general</i>	XI
Bibliografía	80

Índice de figuras

- 1.1. Figura esquemática que representa dos estados de igual energía. Para ir de un estado a otro se necesita superar una barrera de energía igual a $\Delta E = K_a V$. Si esta barrera de energía es igual a $k_b T$ o menor, el momento magnético podrá estar en cualquiera de los dos estados y si se toma el promedio temporal de la magnetización dentro de un tiempo, este será igual a cero. 6
- 1.2. Figura publicada por Nielsch *et al.* [18] que muestra una representación de un arreglo de nanohilos de Níquel que se encuentra en una membrana de alumina (Al_2O_3). Las flechas representan hacia donde está apuntando la magnetización y podrían ser consideradas como “1” o “0” dependiendo de la orientación que tengan. 8
- 1.3. Circuito que contiene una puerta lógica magnética NOT. 10

-
- 1.4. Figura (a) es una representación de una puerta magnética lógica NOT. La figura (b) representa una puerta con un “0” por la izquierda y “1” por la derecha. La figura (c) muestra la demora que hay entre la puerta y la rotación del campo de $T/2$, en donde T es el periodo de un ciclo de la rotación del campo magnético. En este caso ambos nanohilos tienen valor “1”. La figura (d) muestra el caso contrario, cuando el nanohilo tiene un valor “1” por la izquierda y “0” por la derecha. Para más detalles ver D. A. Allwood *et al* [13]. 11
- 2.1. Curva de magnetización para materiales paramagnéticos, antiferromagnéticos y diamagnéticos. 15
- 2.2. Ordenamiento de los momentos magnéticos para distintos tipos de materiales magnéticos.. . . . 16
- 2.3. Curva de histéresis de un material ferrimagnético o ferromagnético. 18
- 2.4. Reducción de la energía magnetoestática por medio de la formación de dominios magnéticos. 27
- 2.5. Esquema de la reversión de la magnetización a lo largo de la curva de histéresis. Después de saturado, el sistema puede revertir a través de una rotación coherente o por medio de la creación y propagación de paredes de dominio. 28

-
- 2.6. Modo de reversión para distintos tipos de hilo. (a) Modo coherente, el que ocurre por lo general cuando el diámetro de la partícula es comparado con el largo del hilo. (b) Modo curling o vortice, con paredes del tipo vórtice. (c) Modo corkscrew, en el que las paredes transversales giran en torno al eje del hilo. (d) Modo transversal, en el que las paredes están sobre un plano fijo definido por la dirección del campo aplicado y el eje del nanohilo. 30
- 3.1. Celda que consta de siete hilos, en donde seis forman un hexágono y el séptimo está en el centro. En este trabajo nos focalizamos en el comportamiento del hilo central. 39
- 3.2. Curvas de histéresis para un nanohilo aislado, y para el hilo central de un arreglo hexagonal de siete hilos con constante de red $D = 40$ nm y 70 nm. 42
- 3.3. Coercividad del nanohilo central en función de la constante de la red. Los hilos tienen diámetro 30 nm y longitud 1000 nm. La línea sólida es una guía 44
- 3.4. Energía dipolar interna del nanohilo central a lo largo de la curva de histéresis. Las curvas son para constantes de red $D = 40$ nm, 70 nm, 120 nm e infinito, que corresponde a un nanohilo aislado. 45
- 3.5. Energía dipolar interna de los siete nanohilos a lo largo de la curva de histéresis. En la parte superior se muestra la energía del hilo central, en la inferior la de los seis nanohilos restantes. 46

- 3.6. Proceso de reversión en un arreglo con $D = 40$ nm a lo largo de una curva de histéresis, para dos semillas distintas. Los momentos magnéticos alineados de forma opuesta al campo son representados con un gris brillante, mientras los que momentos que han revertido aparecen en un gris oscuro. La regiones negras representan las paredes de dominios. (a) La reversión comienza en el hilo del centro, donde las paredes de dominios se forman en los extremos y e propaga hacia el centro. (b) En dos de los hilos de los bordes de la celda se observa una formación de paredes de dominio en la parte central del hilo. Estas paredes se propagan hacia los extremos juntándose con las paredes que se formaron en las puntas. 47
- 3.7. Esquema del proceso de reversión de la magnetización para el sistema estudiado. (a) La distancia de separación entre hilos es de 40 nm. Se observa que el primer hilo en revertir es el del centro. (b) La distancia de separación es de 70 nm. Se observa que el ultimo hilo en revertir es el hilo del centro. (c) La distancia de separación es de 120 nm. Se observa que los hilos revierten todos por iguales. 49
- 4.1. Definición de la geometría del sistema. La orientación de la magnetización y del campo magnético corresponden a una condición inicial típica 54
- 4.2. Perfil de magnetización típico para $B_a = 1,6$ kOe: (a) $\mu_z(z)$ y (b) $(1 - |\mu_z(z)|)$. En este caso es fácil identificar la pared de dominio centrada en $z_w = 250$ nm. La magnetización delante y detrás de la pared es homogénea, y el proceso de reversión puede ser descrito por medio de $z_w(t)$ 56

- 4.3. Instantáneas de los perfiles de la magnetización a lo largo del hilo en dos instantes diferentes del proceso de reversión, con $B_a = 1,6$ kOe. La línea de trazos ilustra \bar{m}_z , la de puntos ilustra \bar{m}_x , y la línea sólida muestra \bar{m}_y . La figura (a) corresponde $\theta_B = 0^\circ$, reversión que ocurre vía el modo corkscrew. Los perfiles de x e y cambian con el tiempo, indicando que el plano de la pared rota alrededor del eje z . La figura (b) corresponde a $\theta_B = 15^\circ$, y la reversión de la magnetización ocurre vía el modo transversal. El perfil de la magnetización presenta una forma constante en los distintos momentos. La figura (c), para $\theta_B = 30^\circ$, muestra una reversión con multidominios. La estructura de paredes se pierde durante la propagación debido a la formación de múltiples dominios a lo largo del hilo. 57
- 4.4. Tiempos de espera para diferentes valores del campo aplicado, con $\theta_B = 0^\circ$ 59
- 4.5. Posición de la pared en función del tiempo. 60
- 4.6. Taza de disipación de energía (eje derecho, cuadrados) y velocidad de la pared (eje izquierdo, círculos) como función del campo aplicado. Los símbolos abiertos corresponden a una propagación detonada por un pulso de campo. 61

- 4.7. Perfil de la magnetización para (a) $B_a = 1,3$ kOe, (b) $B_a = 2,4$ kOe y (c) $B_a = 3,0$ kOe. Los distintos estilos de líneas muestran las diferentes etapas de la propagación de la pared de dominio a lo largo del hilo. Los tiempos de reversión en (a), (b) y (c) son tiempos independientes entre sí. Para campos $B_a \gtrsim 2,4$ kOe, se observa que la región que está delante y próxima a la pared de dominio comienza a ser inestable y para $B_a \gtrsim 3,0$ kOe se observan dominios revertidos que han nucleado delante de la pared de dominio, es decir, múltiples paredes de dominio. 62
- 4.8. Tiempo de reversión magnética como función del ángulo del campo aplicado, θ_B , para diferentes valores de campo. Los valores de t_r representan promedios sobre seis realizaciones. Las flechas delimitan regiones en las cuales se forman múltiples paredes de dominio. 64
- 4.9. Velocidad de propagación de la pared como función de θ_B para $B_a = 1,3$ kOe. 65
- 5.1. Parámetros geométricos de un nanotubo magnético. 71
- 5.2. Instantáneas de la reversión magnética de tubos definidos por $\beta = 0,17$ (a), $0,33$ (b) y $0,5$ (c) en dos etapas diferentes del proceso de reversión. En ellas se muestran los promedios de las componentes de la magnetización en la posición z del tubo. \bar{m}_x : línea de puntos azul, \bar{m}_y : línea de trazos roja y \bar{m}_z : línea sólida negra. 74
- 5.3. Radio crítico como función de β para diferentes nanotubos magnéticos [6]. 75

Capítulo 1

Introducción

1.1. Aspectos generales

Uno de los aspectos interesantes de estudiar física es la posibilidad de explicar y poder usar en nuestro beneficio lo que nos entrega la naturaleza, como lo que ocurre por ejemplo con la magnetita (Fe_2O_3), que tiene la propiedad de atraer al hierro, cobalto, níquel y otras aleaciones de estos materiales. Esta recibe el nombre de atracción magnética. El término magnetismo no tiene un origen bien definido. Una versión ampliamente difundida dice que viene de Magnesia, una ciudad de Asia Menor donde abunda la magnetita, mientras otra versión señala que el nombre proviene de un pastor de nombre Magnes, quien quedó pegado a la tierra debido a sus sandalias, las cuales deben de haber contenido hierro, y a la abundancia de magnetita en el suelo [7].

Lo interesante es que ya en la época 600 A. C. Tales de Mileto describía de forma detallada el comportamiento de un imán (magnetita) y dos siglos después, Sócrates postuló que la magnetita no solo podía atraer trozos de hierro sino que además, tenía la capacidad de impartir un poder similar a

esos trozos de hierro, para que a su vez, ellos pudiesen atraer otros pedazos de ese mismo material. Este fenómeno lo conocemos actualmente como magnetización por inducción [7].

Una de las aplicaciones más importantes que se le dio a esta propiedad fue la invención de la brújula por parte de los chinos, posterior al descubrimiento del magnetismo terrestre, que significó un gran avance en la navegación. Realmente no se sabe quién inventó la brújula, pero si se sabe que el científico Shen Kua (1031-1095) escribió sobre la brújula magnética y a su vez mejoró la precisión de navegación empleando el concepto astronómico del Norte Absoluto.

El inicio de estudios rigurosos sobre magnetismo se sitúa en el año 1600 d.c., cuando William Gilbert de Colchester publicó en Londres “De Magnete”. En esa obra de seis volúmenes explica con lujo de detalle sus experimentos sobre cuerpos magnéticos y atracciones eléctricas. Además observa que una aguja magnética apunta siempre al norte magnético terrestre, concluyendo que la tierra actúa como un gran imán. También fue la primera persona en introducir los términos de atracción eléctrica, fuerza eléctrica y polo magnético. Por otra parte, observó que se pierde la magnetización en el hierro cuando éste se calienta a una temperatura superior a 1043 K. Esta temperatura se conoce como temperatura de Curie. El estudio del magnetismo fue realizado de forma independiente al estudio de las propiedades eléctricas de los materiales. Esto hasta finales del siglo XIX, cuando Hans Christian Oersted descubrió la relación entre electricidad y magnetismo con un experimento sencillo. Demostró de forma empírica que un hilo conductor por el cual circula una corriente eléctrica podía mover la aguja imantada de una brújula. Este experimento da a entender que podría haber una relación entre fuerza eléctrica y magnética. Los resultados fueron dados a conocer en un pequeño artículo titulado “Experimenta circa effectum conflictus electrici in acum

magneticam”. Este artículo no da ninguna explicación del fenómeno, pero Ampère, al conocer estos resultados, elaboró en pocas semanas un complejo trabajo matemático donde expone una completa teoría sobre el fenómeno que hemos mencionado. Con este trabajo, André Marie Ampère se convierte en el fundador de la rama de la electrodinámica. Diez años más tarde, Michael Faraday descubrió la Inducción electromagnética, que permite la operación de transformadores, generadores, motores eléctricos y la mayoría de las máquinas eléctricas. Maxwell se planteó el objetivo de justificar matemáticamente los conceptos físicos descritos únicamente de forma cualitativa, como son la ley de inducción electromagnética y de los campos de fuerzas enunciadas por Faraday. Con este objetivo, Maxwell introdujo el concepto de onda electromagnética que permite una descripción matemática adecuada de la relación entre electricidad y magnetismo mediante célebres ecuaciones que describen y cuantifican los campos de fuerzas.

Cuatrocientos años después de la publicación de “De Magnete” siguen surgiendo aplicaciones en las que el magnetismo cumple un rol fundamental. Actualmente la comunidad científica está interesada en el estudio de materiales de tamaño nanométrico (10^{-9} m), los que presentan propiedades únicas con respecto a materiales de dimensiones mayores (tipo bulk). Dentro de estos sistemas, los materiales magnéticos son de gran relevancia debido a sus potenciales aplicaciones como sistemas de almacenamiento de datos y en biomedicina.

Esta tesis intenta dar una visión general de los fenómenos físicos que se pueden encontrar en partículas magnéticas nanométricas. En particular, estamos interesados en investigar la interacción dipolar y los métodos de reversión de la magnetización en nanohilos magnéticos. Además, extenderemos nuestra investigación al caso de los nanotubos magnéticos, los cuales presentan una menor densidad y pueden ser útiles como portadores de fármacos,

al flotar en soluciones.

¿Por qué la comunidad científica está interesada en estudiar arreglos de nanohilos magnéticos o simplemente un nonanohilo magnético? La respuesta proviene de las necesidades del mundo actual. En estos momentos estamos en la era de la información, donde los medios de almacenamiento de la información son en su mayoría magnéticos o papel. Un arreglo de nanohilos presenta grandes

1.2. Discos rígidos Magnéticos

Los discos rígidos magnéticos son un medio de almacenamiento magnético que cuenta con una tecnología más avanzada con respecto a otros sistemas de almacenamientos, como las cintas de video, las tarjetas magnéticas, etc. Todos presentan los mismos principios físicos en su funcionamiento, y de hecho, el disco rígido actual guarda aún similitudes con el telégrafo de Pioulsen del siglo XIX. Los principios que gobiernan el funcionamiento de un disco rígido son tres: Ley de Ampère (se crean campos magnético a partir de corrientes eléctricas), Ley de Faraday-Lenz (variaciones de campos magnéticos producen una tensión en una bobina) e Interacción de Zeeman (los dominios en un material magnético tienden a orientarse en la dirección de un campo externo aplicado) [9].

Los componentes básicos de un disco rígido son el medio magnético (medio donde se guarda la información), el transductor (cabezal de lectura y escritura), la electrónica y las partes mecánicas [9]. El corazón de esta tecnología lo constituye el transductor magnético y el medio de almacenamiento. El medio magnético puede estar constituido de dominios magnéticos, que son un conjunto de elementos magnéticos básicos (granos, cilindros, hilos, etc) cuya magnetización apunta en la misma dirección. Para aplicaciones en el

ámbito de la grabación magnética se requiere que el medio tenga un campo coercitivo grande (material duro) y estabilidad magnética y térmica. Es por esto que los granos deben de estar ordenados en forma cristalina, ser magnéticamente aislados y presentar una alta anisotropía (cristalina o de forma) [9]. Con el objetivo de aumentar la densidad de información, se necesita reducir el tamaño de los dominios magnéticos. Además, requerimos que la información magnética sea estable durante un tiempo razonable (digamos unos 10 años). Sin embargo, a medida que el tamaño de las partículas disminuye, también disminuye el tiempo de estabilidad magnética, debido a lo que se conoce límite superparamagnético.

1.2.1. Límite Superparamagnético

Un medio magnético de almacenamiento necesita tener una cierta estabilidad magnética para mantener la información guardada. Si se desea aumentar el número de bits por pulgada es necesario disminuir el tamaño de estos. Sin embargo, esta disminución tiene un límite conocido como el límite superparamagnético. Consideremos un monodominio magnético que apunta en una cierta dirección \hat{n} debido a una anisotropía cristalina o anisotropía de forma de la forma uniaxial (ver capítulo 2). El sistema tiene dos estados posibles para la magnetización, paralela o antiparalela a \hat{n} . Para pasar de un estado a otro la partícula requiere una energía de activación $\Delta E = K_a V$, donde V representa el volumen de la partícula y K_a es la constante de anisotropía (ver Fig. 1.1). Ahora, si la partícula es muy pequeña, se puede cumplir que la energía de activación sea comparable (o mayor) con la energía térmica, $k_b T \gtrsim K_a V$, con k_b la constante de Boltzmann y T la temperatura. Si esto ocurre, el sistema comienza a fluctuar de un estado a otro perdiendo su estabilidad magnética [8] y así la información almacenada.

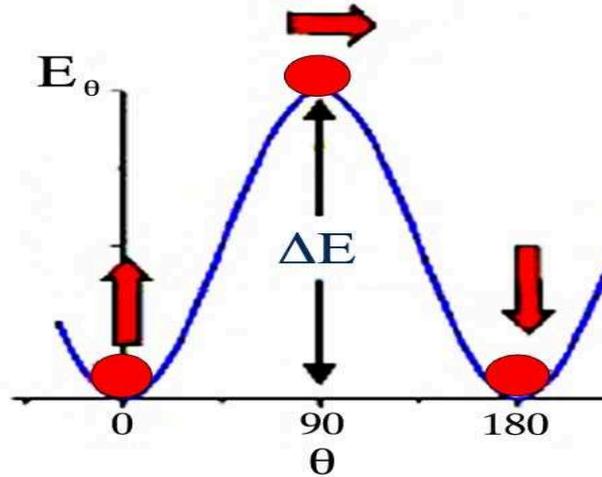


Figura 1.1: Figura esquemática que representa dos estados de igual energía. Para ir de un estado a otro se necesita superar una barrera de energía igual a $\Delta E = K_a V$. Si esta barrera de energía es igual a $k_b T$ o menor, el momento magnético podrá estar en cualquiera de los dos estados y si se toma el promedio temporal de la magnetización dentro de un tiempo, este será igual a cero.

Para entender el concepto de superparamagnetismo, tomaremos una distribución de monodominios magnéticos no interactuantes, entonces para $k_b T \gg K_a V$ el sistema es paramagnético. Pero si cada una de esas partículas no está formada por un momento magnético sino de un grupo de momentos magnéticos, entonces el sistema se llama superparamagnético. Se tiene entonces que para altas temperaturas, los momentos magnéticos de la partícula fluctúan rápidamente. Para entender mejor este límite, consideremos que la relajación de la magnetización de la partícula está dada por la Ley de Arrhenius, donde el relajamiento de la magnetización de la partícula presenta un tiempo

característico dado por la barrera de energía ($K_a V$) y la temperatura [16]:

$$\tau = \tau_0 \exp(K_a V / k_b T), \quad (1.1)$$

en donde τ_0 es una constante asociada a la frecuencia de tentativas de saltos del momento magnético entre los estados de mínima energía (estados opuestos en el eje fácil de magnetización). Su valor puede ser calculado de forma experimental o teórica y está entre 10^{-9} y 10^{-10} s [16]. Esta relajación de la magnetización depende del tiempo de medida, es decir, si el tiempo de medida es mucho mayor que el tiempo de relajación de la magnetización, entonces el sistema relaja muy rápidamente como para ser observado; pero si el tiempo de medida es menor que el tiempo de relajación entonces se dice que el sistema está bloqueado. La temperatura que separa estos regímenes se denomina temperatura de bloqueo T_B (se cumple $\tau_m = \tau$). Para obtener el volumen crítico para el cual la magnetización es estable a una temperatura T_0 se tiene que cumplir que $\tau_m = \tau$ de donde obtenemos [16]:

$$\ln \left(\frac{\tau_m}{\tau_0} \right) = \frac{K_a V_{crit}}{k_b T_0} \quad (1.2)$$

Por ejemplo, si tomamos una partícula esférica de cobalto y requerimos una estabilidad mínima de 10 años a temperatura ambiente, entonces tendremos que el diámetro de nuestra partícula no puede ser menor que 9 nm [17].

1.2.2. Arreglo de nanohilos magnéticos

Con el objetivo de querer alcanzar densidades del orden de los Tbi/in² [9], se ha propuesto utilizar sistemas de arreglos donde los bits sean pequeños y magnéticamente estables. Un arreglo de nanohilos magnéticos tiene la ventaja de que cada nanohilo puede ser considerado como un bit y es magnéticamente estable debido a su gran anisotropía de forma. (ver ecuación 1.2 y figura 1.2).

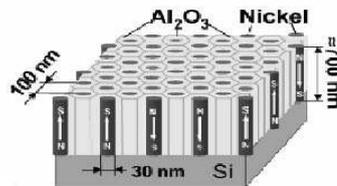


Figura 1.2: Figura publicada por Nielsch *et al.* [18] que muestra una representación de un arreglo de nanohilos de Níquel que se encuentra en una membrana de alumina (Al_2O_3). Las flechas representan hacia donde está apuntando la magnetización y podrían ser consideradas como “1” o “0” dependiendo de la orientación que tengan.

Otra aspecto a considerar es que la pureza, el control de los diámetros de estos nanohilos, su separación y el orden que presentan entre ellos es de gran precisión [18, 19]. Los problemas que presentan estos arreglos se debe a la interacción dipolar entre los hilos, es decir, cada elemento interactúa con produciendo efectos difíciles de identificar. Otro aspecto a considerar es que el pulso de escritura es difícil de sincronizar con la periodicidad del arreglo [17].

1.3. Arquitecturas lógicas de paredes de dominio magnético

Actualmente existe una propuesta de crear nuevas memorias y puertas lógicas magnéticas utilizando nanohilos magnéticos planares de Permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$). Los sistemas de uniones de túneles magnéticos (en bloques forman la memoria magnética de acceso random, MRAM) tienen que usar una alta densidad de corriente para cambiar la data (1 o 0) y requieren del uso de transistores grandes [15]. La arquitectura lógica magnética no usa transistores y libera muy poco calor al cambiar de data [15]. Este sistema usa el hecho de que una pared de dominio es la interfaz de dos direcciones opuestas de la magnetización. Además, la anisotropía de forma del nanohilo favorece que la magnetización se alinee a lo largo de su eje. Esta interfaz, la pared de dominio, puede moverse a través de los nanohilos mediante la aplicación de un campo externo [10,11,12] mayor que el nivel umbral [14]. Ahora, para que se propague en el “circuito”, la pared debe pasar por las curvas del circuito, como muestra la figura 1.3. Por ende el campo magnético debe de estar rotando. Cuando pasa por una curva de 90 grados, la pared experimenta una demora de $T/4$ con respecto al periodo de rotación T del campo magnético [14]. En la actualidad hay varios elementos lógicos magnéticos, pero para dar una ilustración de cómo funciona uno de ellos, tomaremos el caso de una puerta lógica NOT.

Una puerta lógica NOT consiste en que si la señal de entrada es un “1”, la señal de salida será un “0” y viceversa. Tomaremos como valor 1 si los momentos magnéticos del nanohilo apuntan en el mismo sentido en el que se mueve la pared y “0” si apunta en la forma opuesta. La construcción con

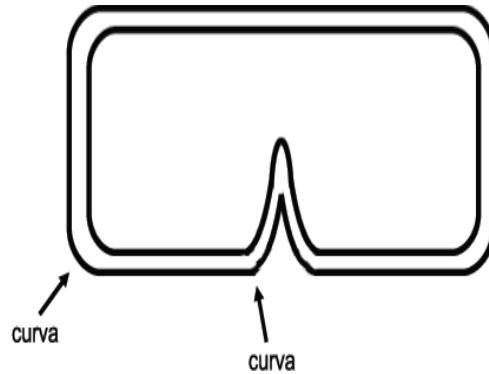


Figura 1.3: Circuito que contiene una puerta lógica magnética NOT.

nanohilos de una puerta NOT es haciendo una “i” latina con dos nanohilos (ver Figura 1.4(a)). Al estar construido con dos nanohilos que se unen de esa forma, y teniendo ambos nanohilos una curva de 90 grados, se produce una demora de $T/2$ [13]. La puerta funciona mediante el siguiente esquema: *a*) el campo va rotando en sentido antihorario de \hat{x} a \hat{y} haciendo que la pared se mueva de izquierda a derecha en el nanohilo de la izquierda. El nanohilo de la izquierda tiene valor “0” mientras que el de la derecha tiene valor “1”. Ver la Figura 1.4(b). *b*) se produce el retraso de la pared de dominio con el ciclo del campo. Cabe mencionar que los valores máximos de H_x y H_y no son iguales. H_x es igual a 30 Oe y de H_y igual a 60 Oe. Ambos nanohilos presentan el valor “1”. Ver la Figura 1.4(c). *c*) Se observa que el campo rota de \hat{y} a $-\hat{x}$ y se observa ahora que el nanohilo de la izquierda es “1” mientras que el de la derecha es “0”. Ver la Figura 1.4(d).

La ventaja de hacer puertas lógicas de esta manera reside en su simplicidad y bajo costo [15].

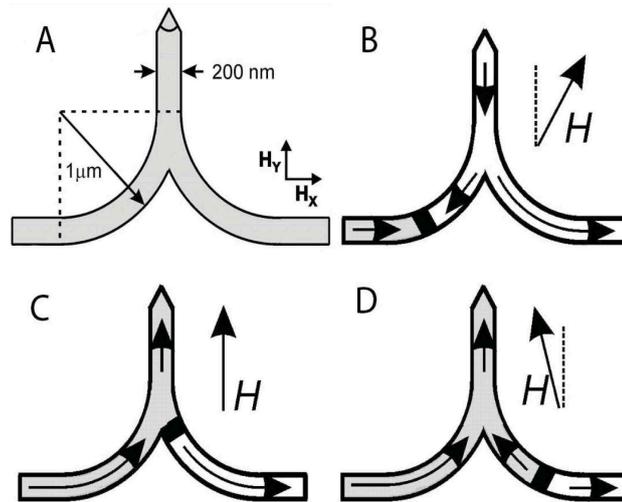


Figura 1.4: Figura (a) es una representación de una puerta magnética lógica NOT. La figura (b) representa una puerta con un “0” por la izquierda y “1” por la derecha. La figura (c) muestra la demora que hay entre la puerta y la rotación del campo de $T/2$, en donde T es el periodo de un ciclo de la rotación del campo magnético. En este caso ambos nanohilos tienen valor “1”. La figura (d) muestra el caso contrario, cuando el nanohilo tiene un valor “1” por la izquierda y “0” por la derecha. Para más detalles ver D. A. Allwood *et al* [13].

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

En este capítulo daremos una visión de los conceptos físicos esenciales para poder estudiar y comprender las propiedades magnéticas de los sistemas que estudiaremos más adelante. Si el lector desea profundizar en dichos conceptos, puede recurrir a los libros escritos por A. Aharoni [20], G. Bertotti [64], R. C. O’Handley [21], N. Spaldin [22], J. D. Jackson [23], W. F. Brown, Jr. [24], etc. También se puede recurrir a las tesis escritas por J. Escrig [17], P. Landeros [25] y J. Palma [26].

2.1. Conceptos básicos

Para comprender las propiedades magnéticas de un material se debe primero ir a su elemento fundamental, el momento magnético. Este elemento puntual es un vector que, en presencia de un campo magnético \vec{H} , experimenta un torque, el cual hace que se alinee en la dirección del campo. El momento magnético es el resultante vectorial de contribuciones de dos tipos de fuentes. Estas fuentes son principalmente el movimiento de cargas eléctricas y el momento magnético intrínseco, o espín, que tienen las partículas funda-

mentales como los electrones. La interacción entre los momentos magnéticos es responsable de distintas propiedades a nivel micro y macroscópico. Por ejemplo, cuando tenemos sólo un momento magnético, este puede apuntar en cualquier dirección, pero al colocar un segundo momento magnético, se rompe la simetría espacial y la dirección del primer momento está ahora condicionada a la orientación y posición del segundo. Cuando tenemos un gran número de momentos magnéticos, estos pueden ordenarse formando regiones en las cuales todos los momentos magnéticos apuntan en la mismo sentido. Esto se conoce como dominio magnético. La zona que separa dos dominios se conoce como pared de dominio. Estas paredes tienen dimensiones nanométricas o mayores, según el material. El que las paredes sean de tamaño nanométrico hace interesante el estudio de estructuras con dimensiones de este orden, pues ellas no podrán acomodar paredes, debiendo presentar estados magnéticos estables de gran aplicabilidad.

2.2. Clasificación de los materiales magnéticos

Cuando un material es sometido a un campo magnético \vec{H} , los momentos magnéticos del material responden generando un campo neto llamado campo de inducción magnética, \vec{B} . La relación entre \vec{B} y \vec{H} está dada en unidades cgs por:

$$\vec{B} = \left(\vec{H} + 4\pi\vec{M} \right), \quad (2.1)$$

en donde \vec{M} es la magnetización del medio y es definido como N momentos

magnéticos por unidad de volumen:

$$\vec{M} = \frac{\sum_{i=1}^N \vec{m}_i}{V}. \quad (2.2)$$

Dependiendo de su respuesta a un campo externo y de cómo están orientados los momentos magnéticos en su interior, los materiales pueden clasificarse en cinco tipos: diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos. Los materiales diamagnéticos, como por ejemplo bismuto metálico, hidrógeno y gases nobles, no presentan un momento magnético atómico en su estado fundamental, por lo que no poseen magnetización espontánea. Sin embargo, al aplicarles un campo magnético, los electrones generan un campo magnético opuesto al campo \vec{H} , reduciendo el valor del campo externo en el espacio libre. Esto permite distinguir un material diamagnético al acercarlo a un imán, pues será repelido por éste. En la figura 2.1 se ilustra la relación entre la magnetización \vec{M} y el campo \vec{B} para diferentes materiales, y se puede observar que la pendiente, llamada susceptibilidad, entre ambas cantidades es negativa. Los materiales paramagnéticos, como aire, aluminio, magnesio, titanio y wolframio entre otros, presentan momentos magnéticos atómicos no nulos, pero la interacción entre momentos vecinos es cero, es decir, apuntan en diferentes direcciones, generando una magnetización neta nula en el material en ausencia de campo externo, figura 2.2. Sin embargo, al estar sometido a un campo externo, los momentos magnéticos atómicos se ordenan con el campo, mostrando una susceptibilidad positiva, como indica la figura 2.1. Los llamados materiales ferromagnéticos, como por ejemplo el níquel, el cobalto y hierro, presentan momentos magnéticos atómicos distintos de cero. Asimismo, momentos magnéticos vecinos interactúan, de forma que se alinean paralelamente entre sí, presentando una magnetización neta, figura 2.2. Los materiales antiferromagnéticos, como por ejemplo algunos óxidos como MnO, FeO, GdO y NiO,

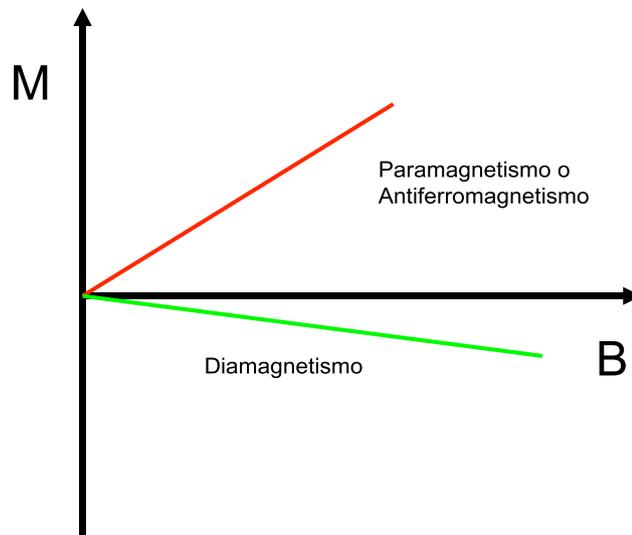


Figura 2.1: Curva de magnetización para materiales paramagnéticos, antiferromagnéticos y diamagnéticos.

presentan momentos magnéticos atómicos netos, pero la interacción entre los vecinos genera dos subredes. Cada una de ellas es una red ferromagnética, pero sus magnetizaciones son antiparalelas entre sí. De esta forma, a primeros vecinos todos los vecinos son antiferromagnéticos. De esta forma, su magnetización neta en ausencia de campo es cero, figura 2.2. Al aplicar un campo magnético externo, se observa un comportamiento similar a un material paramagnético, es decir una susceptibilidad positiva. Un último grupo, los materiales ferrimagnéticos, como por ejemplo la magnetita, presentan estas dos subredes antiferromagnéticas, pero la magnitud de los momentos atómicos en una subcelda es mayor que en la otra, presentando entonces una magnetización neta en alguna dirección, figura 2.2.

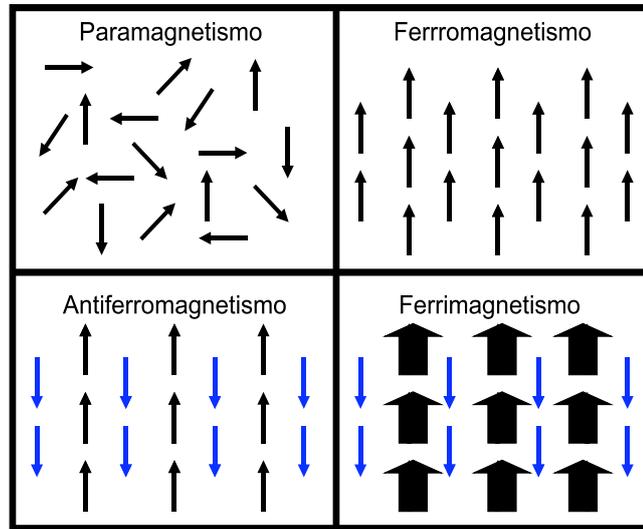


Figura 2.2: Ordenamiento de los momentos magnéticos para distintos tipos de materiales magnéticos..

Los materiales ferromagnéticos y ferrimagnéticos se encuentran en la naturaleza, por lo general, con una magnetización neta igual a cero. Esto debido a que el tiempo hace que se acomoden diversos dominios en ellos, de forma de minimizar la energía creando dominios de cierre.

Como ya se explicó los materiales diamagnéticos, paramagnéticos y antiferromagnéticos, en ausencia de campo externo \vec{B} presentan magnetización cero. Al aplicarles un campo \vec{B} presentan algún tipo de magnetización, la que vuelve a ser cero una vez que se apaga el campo. En cambio, en los materiales ferromagnéticos y ferrimagnéticos se observa una magnetización neta aún después de apagar el campo. Esto se conoce como histéresis magnética. La histéresis es un concepto general que implica que una propiedad se puede mantener en ausencia del estímulo que la ha generado. La histéresis magnética se debe a un reordenamiento de los dominios magnéticos, los cuales, una vez apagado el campo, no pueden desordenarse rápidamente entre si debido a que el campo ha removido las paredes. La creación de estas requiere un

campo extra o un tiempo muy largo.

2.3. Curva de histéresis

El estudio de una curva de histéresis en general es complejo, pues involucra estados fuera del equilibrio y procesos de memoria. Es decir, la magnetización del sistema no sólo depende del valor del campo externo, sino también de la historia de aplicación del campo, vale decir, de los estados que presentó el sistema frente a los valores que tomó el campo previamente. Un excelente libro para estudiar curvas de histéresis es el texto escrito por G. Bertotti [64].

Para trazar la curva de histéresis de un material, se debe elegir la dirección de aplicación del campo externo. Esta se elige usualmente como las direcciones de los ejes de fácil y difícil magnetización, relacionados con la cristalinidad y forma de la partícula que se mide. Para trazar una curva de histéresis, como la que ilustra la figura 2.3, partimos con una muestra no imanada o desmagnetizada (con magnetización total nula). Luego comenzamos a aplicar el campo con variaciones constantes hasta que la magnetización alcanza un máximo, conocido como magnetización de saturación, M_s , como muestra la figura 2.3. En este momento todos los momentos magnéticos de la muestra apuntan en la dirección del campo externo. La rama de la curva que va desde el estado desmagnetizado a campo cero hasta la saturación se conoce como curva virgen. Luego se disminuye el campo hasta que la muestra sature en sentido opuesto, y finalmente se aumenta el campo externo hasta que la muestra sature nuevamente. Por lo general la magnetización de una muestra a cualquier valor de campo se presenta normalizada por la magnetización de saturación, quedando entonces con valores entre -1 y 1 .

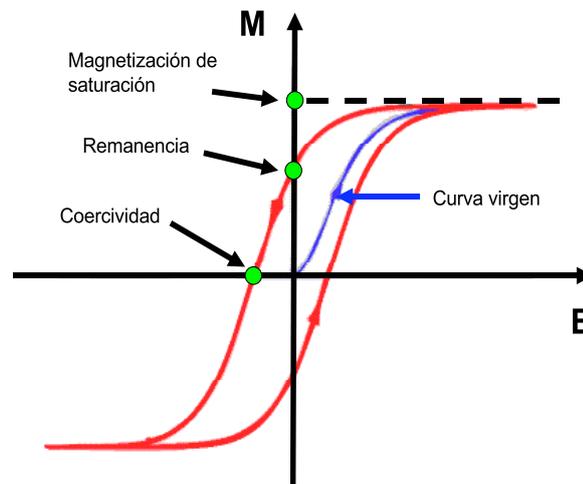


Figura 2.3: Curva de histéresis de un material ferrimagnético o ferromagnético.

La curva de histéresis contiene información importante, pero su análisis no es simple pues la curva depende no sólo de las características propias de la muestra, como forma y material, sino también del método utilizado para trazarla. A partir de ella podemos ver si el sistema presenta una reversión simétrica de la curva de histéresis, es decir, si recorre el mismo camino para ir de magnetización normalizada 1 a -1 , que de -1 a 1. También es importante extraer el campo coercitivo o coercividad, B_c , la cual se ilustra en la figura 2.3. También nos puede entregar información sobre las interacciones presentes en el sistema, a partir de la cuadratura de la curva (El valor de la cuadratura va entre 0 y 100% y mientras más cercano al 100% menos interacción hay en el sistema. Esta última afirmación es para sistemas que están compuestos con un gran número de partículas que interactúan entre sí y en donde la dirección que apunta el campo para hacer la curva de histéresis es la dirección de eje fácil para la magnetización del sistema.). Otro parámetro interesante es la remanencia, la que se define como la magnetización a campo

externo nulo, medida una vez que la muestra ha saturado (ver figura 2.3). La remanencia toma valores entre 0 y 1, ya que también está normalizada por la magnetización de saturación. La cuadratura de la curva de histéresis se define como

$$S = \left(1 - \frac{M_s m_r}{\chi_0 B_c}\right) \times 100, \quad (2.3)$$

donde m_r es la remanencia (entre 0 y 1) y $\chi_0 = [\partial M / \partial B]_{B_c}$ es la pendiente de la curva o susceptibilidad magnética en B_c .

2.4. Principales energías involucradas en un sistema magnético

Consideremos un momento magnético \vec{m} en una posición fija de la red, sometido a un campo de inducción magnética \vec{B} . La energía de interacción entre ambos se puede obtener a partir de la fuerza entre ellos, la fuerza de Lorentz. Ella nos permite obtener la energía de interacción entre el momento magnético y el campo magnético esta dada por

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B}. \quad (2.4)$$

En esta forma general el campo \vec{B} no necesariamente es el campo externo al sistema, sino es el campo total, el cual incluye también al campo debido a las interacciones de cada partícula con las otras partículas del sistema. Si tenemos N momentos magnéticos en nuestro sistema, nuestra energía de interacción total del sistema será

$$E_{total} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i, \quad (2.5)$$

donde \vec{B}_i es el campo efectivo que experimenta el momento magnético i . Con esto último queda claro que el problema se traduce entonces en obtener el

campo \vec{B}_i . A continuación definimos las contribuciones más importantes a este campo efectivo en un material ferromagnético, que es el tipo de material que consideraremos en esta tesis.

2.4.1. Interacción de Intercambio

Esta interacción es la que da origen al ferromagnetismo y es de corto alcance. Su origen es cuántico, es decir, se origina en el solapamiento de las funciones de onda entre dos átomos o iones vecinos. La función de onda de un electrón está dada por el producto de una función de onda espacial y una de espín. Este acoplamiento hace que dos electrones que tienen sus espines paralelos (función de onda de espín simétrica) no le es permitido acercarse espacialmente entre ellos, lo que si podrían hacer si tuvieran espines antiparalelos (función de onda de espín antisimétrica).

En 1923 Dirac mostró que para electrones localizados en orbitales ortogonales, el efecto del principio de Pauli es equivalente a la introducción de un término en el Hamiltoniano conocido como el Hamiltoniano de Heisenberg, que es de la forma:

$$E_{int} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.6)$$

en donde \vec{S}_i es el momento angular del espín de un ion localizado en el i -ésimo sitio de la red y J_{ij} es la integral de intercambio que da a lugar la magnitud del acoplamiento entre los espines i y j . El símbolo $\langle ij \rangle$ corresponde a que $J_{ij} = J$ si los átomos son primeros vecinos y $J_{ij} = 0$ para todo otro caso. Esto último da cuenta de que la interacción es de corto alcance. Si $J > 0$ el material es ferromagnético, en cambio si $J < 0$ el material es antiferromagnético.

En esta tesis nosotros usaremos este Hamiltoniano para considerar la

interacción de dos momentos magnéticos atómicos, quedando de la forma:

$$E_{int} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j, \quad (2.7)$$

es decir, el campo que siente el momento magnético i es:

$$\vec{B}_i = \sum_{j \in \langle ij \rangle} J_{ij} \vec{m}_j. \quad (2.8)$$

Una observación importante es que al considerar este Hamiltoniano se asume que los electrones están localizados. Entonces, para poder utilizar este Hamiltoniano en metales como Fe, Ni, y Co, los momentos magnéticos toman valores no enteros de magnetones de Bohr (0,6 para el Ni, 1,7 para el Co y 2,2 para el Fe). En estos la banda 3d está superpuesta con la banda 4s, de tal forma que las bandas están llenas hasta el nivel de Fermi, por lo tanto los electrones ya no están todos en la banda 4s sino que también están en la banda 3d. Esto hace que el número de electrones por átomos que contribuyen a la magnetización (3d) no sea un número entero, como se muestra experimentalmente.

Se debe notar que esta interacción presenta simetría rotacional. Es decir, si en el sistema sólo existe interacción de intercambio con una constante $J > 0$, entonces tenemos que los momentos se alinean y apuntan en una misma dirección, pero la dirección hacia la que apuntan queda indeterminada, por lo que pueden apuntar en cualquier dirección.

2.4.2. Interacción de Zeeman

La interacción que experimenta un momento magnético cuando está en presencia de un campo de inducción magnética \vec{B}_a se conoce como energía de Zeeman. Esta energía de interacción tiene la forma dada por la ecuación 2.4, donde el campo que experimenta el momento magnético es simplemente \vec{B}_a .

La energía de Zeeman es mínima cuando el campo tiene la misma dirección y sentido que el momento magnético atómico o iónico.

2.4.3. Interacciones anisotrópicas

Son todas las interacciones propias del sistema que rompen la invarianza rotacional de este. En otra palabra, son las interacciones causantes de que existan direcciones preferenciales de la magnetización. Estas direcciones son llamadas ejes de fácil magnetización y son las direcciones hacia las que la magnetización tiende a apuntar a objeto de minimizar la energía. Además, gracias a estas interacciones es que hoy en día se pueda almacenar información en medios magnéticos, pues son ellas las que permiten la estabilidad de la información.

Anisotropía uniaxial y Anisotropía Cúbica

A continuación describiremos dos de los rompimientos de simetría rotacional más comunes, las anisotropías uniaxial y cúbica.

1. *Anisotropía uniaxial*

Este tipo de anisotropía aparece cuando existe una única dirección privilegiada hacia la cual la magnetización quiere apuntar. La energía de anisotropía, f_{AN} , es invariante a rotaciones con respecto a este eje particular y sólo depende de la orientación relativa de \vec{m} con respecto a este eje principal. Por ejemplo, si tomamos el eje z como el eje de anisotropía, $f_{AN}(\vec{m})$ será una función de $m_z = \cos\theta$. Debido a que presenta simetría de inversión, $f_{AN}(\vec{m})$ se puede escribir como:

$$f_{AN}(\vec{m}) = K_0 + K_1 \sin^2\theta + K_2 \sin^4\theta + K_3 \sin^3\theta + \dots, \quad (2.9)$$

en donde se usó que $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta$. Las constantes K_1 , K_2 y K_3 son llamadas constantes de anisotropía, pero por simplicidad consideraremos sólo $K_1 \neq 0$. Si $K_1 > 0$ se tienen dos mínimos $\theta = 0$ y $\theta = \pi$, es decir, la magnetización tiene como eje fácil la dirección z , pudiendo apuntar hacia $+z$ o $-z$. Si $K_1 < 0$ se tiene que el mínimo se encuentra para $\theta = \pi/2$, lo que significa que \vec{m} preferirá apuntar en el plano $x-y$, generando un plano de fácil magnetización.

2. Anisotropía Cúbica

Esta simetría considera que ya no hay solo una dirección privilegiada sino tres. Los términos de $f_{AN}(\vec{m})$ deben ser invariantes a la permutación de estos ejes preferenciales, presentando también simetría de inversión con respecto a ellos. Consideremos por ejemplo que nuestros ejes preferenciales son x , y y z . Entonces los términos relevantes de $f_{AN}(\vec{m})$, a primer orden, en función de \vec{m} son aquellos que presentan m_x , m_y y m_z , los cosenos directores, en las siguientes expresiones: $m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2$, $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$, y $m_x^4 + m_y^4 + m_z^4$.

Estos dos últimos términos pueden omitirse debido a que uno es simplemente una constante, $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$ y el otro depende del anterior mediante la relación:

$$m_x^4 + m_y^4 + m_z^4 + 2(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) = (m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)^2 = 1. \quad (2.10)$$

De esta forma $f_{AN}(\vec{m})$ se puede escribir como:

$$f_{AN}(\vec{m}) = K_0 + K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + \dots \quad (2.11)$$

Si $K_1 > 0$ existen seis mínimos, los que se encuentran en las direcciones x , y y z , esto es la dirección cristalográfica [100]. Además presenta ejes anisotrópicos medio difíciles en la dirección cristalográfica [110]

y existen ocho máximos (ejes difíciles) en la dirección cristalográfica [111]. Si $K_1 < 0$, los máximos se intercambian con los mínimos que se tienen cuando $K_1 > 0$.

Fuentes de anisotropía

Existen numerosas razones para un rompimiento de simetría del sistema. A continuación introducimos las causas más frecuentes para esto.

1. *Anisotropía magnetocrystalina*

En este caso el momento magnético prefiere orientarse en una cierta dirección cristalográfica de la red cristalina. Pero ¿por qué el momento magnético prefiere ciertas direcciones cristalográficas de la red? o ¿como se acopla el momento magnético con la red?. La respuesta se encuentra en el acoplamiento entre el espín, que es parte del momento magnético, con la órbita. Si el campo cristalino visto para un átomo es de baja simetría y además los electrones de conducción de ese átomo tienen una distribución de carga asimétrica, $L_z \neq 0$, entonces los orbitales atómicos interactúan anisotrópicamente con el campo cristalino.

Una predicción cuantitativa de los valores de las constantes anisotrópicas desde el punto de vista cuántico es difícil, más aun pues dependen de la temperatura, por lo cual se determinan experimentalmente. El níquel presenta una anisotropía magnetocrystalina cúbica (anisotropía cúbica) con ejes fáciles en la dirección cristalográfica [111]. Éste material presenta una baja constante anisotrópica, es decir es un material blando, por lo que usualmente se desprecia esta anisotropía en el sistema. El hierro también presenta simetría cúbica, pero con ejes fáciles en la dirección cristalográfica [100]. El cobalto presenta simetría hexagonal, por lo que se caracteriza con una anisotropía uniaxial ($K_1 > 0$).

2. *Anisotropía de esfuerzo y Magnetostricción*

Los mecanismos responsables de la anisotropía magnetocristalina pueden dar lugar a variaciones de la energía cuando las posiciones relativas entre la red y los momentos magnéticos son modificadas. Este tipo de interacción magnetoelástica hace que la red se deforme para poder minimizar la energía total del sistema, lo que se conoce como magnetostricción. Por otra parte, cuando se aplica una fuerza que deforma la red cristalina, la anisotropía resultante se conoce como anisotropía de esfuerzo. Esto último hace que la magnetización tenga direcciones energéticamente favorables. Ambos tipos de anisotropías no serán consideradas en esta tesis.

3. *Anisotropía de Forma*

Corresponde a la anisotropía producida por la interacción dipolar que hay entre los momentos magnéticos. A continuación se presenta esta anisotropía de forma más completa.

2.4.4. Energía dipolar

La energía dipolar, o energía magnetostática, es una de las energías más importantes y complejas de tratar. Esta es una interacción de largo alcance, y depende de la posición de los elementos magnéticos que conforman el sistema. Su origen es la interacción entre momentos magnéticos atómicos o iónicos. Hay que recordar que un momento magnético genera un campo magnético debido a que el átomo presenta corrientes internas. El campo que produce el momento magnético j en la posición del momento i está dado por

$$\vec{B}_d = \frac{3(\vec{m}_j \cdot \hat{n}_{ij})\hat{n}_{ij} - \vec{m}_j}{r_{ij}^3}. \quad (2.12)$$

Asimismo, la energía de interacción entre ambos momentos magnéticos está dada por

$$E_d = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{n}_{ij})}{r_{ij}^3}. \quad (2.13)$$

En estas ecuaciones r_{ij} es la distancia de separación entre los momentos i y j . \hat{n}_{ij} es un vector unitario en la dirección que conecta las posiciones de los momentos magnéticos i y j . Es importante destacar que esta interacción depende de la distancia y de la orientación de los momentos magnéticos. Los momentos magnéticos se ordenarán en un eje preferencial, dependiente de la forma del objeto. Por esta razón esta energía se conoce como anisotropía de forma. En hilos magnéticos, en ausencia de otros términos de anisotropía, los momentos tienden alinearse en la dirección del eje axial del hilo.

2.5. Dominios Ferromagnéticos

Los dominios ferromagnéticos son regiones del material magnético en las cuales los momentos magnéticos apuntan en una misma dirección. Se entiende entonces que un material ferromagnético está desmagnetizado cuando la magnetización neta en los diferentes dominios apunta en distintas orientaciones, haciendo que la magnetización total del material sea cero.

La formación de dominios magnéticos permite al material minimizar la energía total del sistema, cerrando las líneas de campo. Uno de los términos energéticos más importantes en la formación de dominios es la energía magnetostática. Para entender cómo ésta afecta a la formación de dominios, podemos pensar en un bloque ferromagnético magnetizado en una sola dirección, es decir, con un solo dominio magnético. Sabemos que el campo magnético producido por los momentos magnéticos está dada por la relación 2.12. Como observamos de la figura 2.4(a), el campo que produce tiene una dirección opuesta a la dirección de los momentos magnéticos. De esta for-

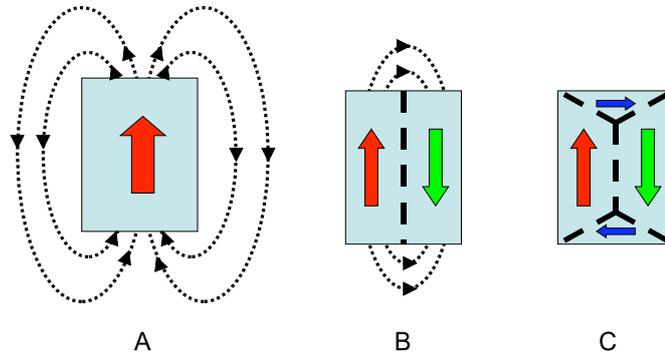


Figura 2.4: Reducción de la energía magnetoestática por medio de la formación de dominios magnéticos.

ma, el campo trata de magnetizar los momentos magnéticos en el sentido opuesto a como están ellos mismos, creando un segundo dominio magnético, 2.4(b). Pero ahora los dos dominios producen un campo que a su vez hace que reviertan otros momentos magnéticos, generando otros dominios. Todo esto ocurre para reducir el campo producido por los momentos magnéticos, llevando finalmente al sistema a un estado desmagnetizado, como muestra la figura 2.4(c). Es por esta razón que a dicho campo se le denomina campo desmagnetizante. Una observación importante es que para lograr la figura 2.4(c), es necesario que el sistema no deje polos magnéticos en la superficie.

Otro aspecto importante para mencionar es que si se tiene un dominio ferromagnético y se crea otro dominio, figura 2.4(b), la energía de intercambio entre ellos aumenta. En otras palabras, la formación de dominios magnéticos hace que la energía de intercambio aumente en la frontera entre ambos, por lo que debe ser compensada con la reducción de otros tipos de energía en el sistema.

Ahora supongamos que aplicamos a una muestra desmagnetizada un cam-

po magnético en una dirección particular (ver figuras 2.5(a) y 2.5(b)), lo que observaremos es que algunos dominios magnéticos aumentan su tamaño mientras que otros disminuyen, es decir, hay un movimiento de las paredes de dominio (figura 2.5(c)) hasta que no hay mas paredes de dominio magnetico, es decir, hay solo un dominio magnetico(figura 2.5(d)). Este proceso es un proceso irreversible. Luego este dominio magnetico se alinea con el campo mediante una rotacion(figura 2.5(e)). este proceso es reversible. En este punto la muestra esta saturada. Cuando tenemos la muestra saturada, figura 2.5(e), y comenzamos a disminuir el campo, lo que observaremos es que el sistema (dependiendo de las interacciones que tenga) puede revertir de dos formas:

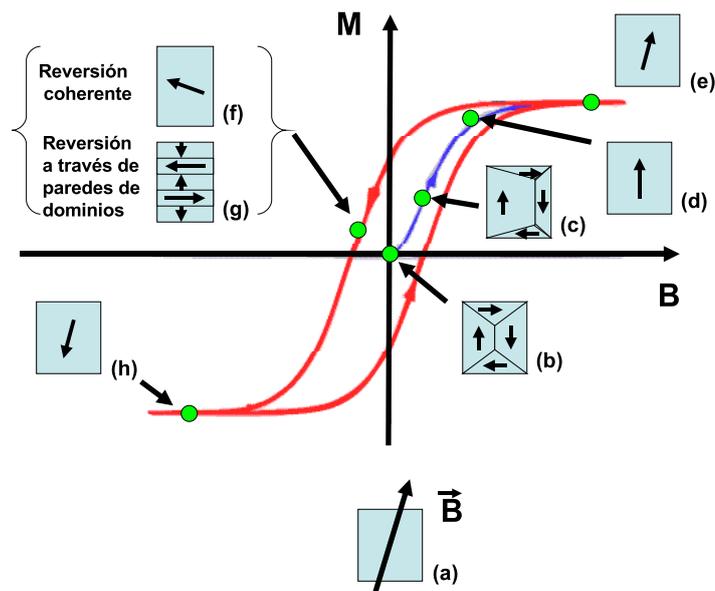


Figura 2.5: Esquema de la reversión de la magnetización a lo largo de la curva de histéresis. Después de saturado, el sistema puede revertir a través de una rotación coherente o por medio de la creación y propagación de paredes de dominio.

1. Reversión coherente: Durante la reversión todos los momentos apuntan en la misma dirección, como se muestra en la figuras 2.5(f) y 2.6(a). Este tipo de reversión no se observa en nanohilos debido a que su largo es mucho mayor que el diámetro [28].
2. Reversión a través de la creación y propagación de paredes de dominio: Como el nombre lo indica, este modo de reversión se genera a través de la creación y propagación de paredes de dominio, debiendo entonces existir en el sistema dos o más dominios magnéticos, figura 2.5(g). Ahora bien, en este modo de reversión se pueden crear paredes de dominio de distinta naturaleza. Por ejemplo, en nanohilos de Ni, Hertel [29] y Forster et al [30] reportaron de forma independiente la existencia de dos tipos de paredes de dominio, vórtice y transversal, dependiendo del diámetro de los hilos. En la pared de dominio de tipo vórtice no existe una componente neta de la magnetización en del plano perpendicular al eje del hilo, figura 2.6(b). Este modo de reversión se le conoce como modo curling o modo vortice. La otra pared es una pared transversal, es decir, presenta una componente neta distinto de cero en el plano perpendicular al eje del hilo, ver figura 2.6(c). Este tipo de modo de reversión se le conoce como modo corkscrew, debido a que cuando se propaga esta pared la dirección hacia la que apunta gira en torno al eje del hilo como si fuera un sacacorchos. Cabe señalar que durante una reversión las paredes pueden nuclear en ambos extremos, por lo que es posible observar dos paredes de dominio. En este caso estas apuntarán en sentidos opuestos para disminuir la energía. [31,32,33]. Por ultimo llamaremos modo transversal al modo en donde la pared de dominio está sobre un plano fijo, por ejemplo, este plano puede estar definido por la dirección del campo aplicado y el eje del nanohilo.

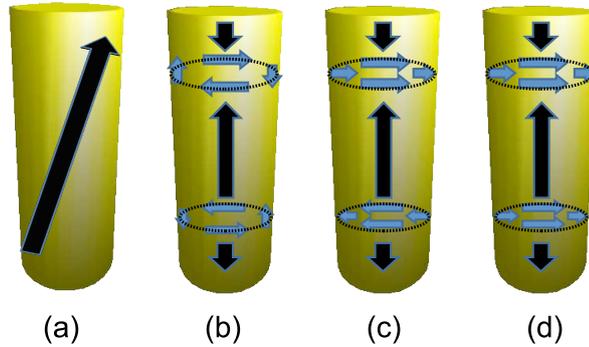


Figura 2.6: Modo de reversión para distintos tipos de hilo. (a) Modo coherente, el que ocurre por lo general cuando el diámetro de la partícula es comparado con el largo del hilo. (b) Modo curling o vortice, con paredes del tipo vórtice. (c) Modo corkscrew, en el que las paredes transversales giran en torno al eje del hilo. (d) Modo transversal, en el que las paredes están sobre un plano fijo definido por la dirección del campo aplicado y el eje del nanohilo.

2.6. Fast Montecarlo

En este apartado describiremos la técnica computacional que se utilizó para realizar esta tesis, permitiéndonos considerar la estructura interna de las partículas. Para mayor información ver las referencias de J. d'Albuquerque e Castro et al [27], P. Vargas [3], P. Landeros et al [28] y M. Bahiana et al [4].

2.6.1. Importancia

Cuando se quiere hacer un estudio detallado de las propiedades magnéticas de un sistema es necesario considerar la estructura interna de las partículas.

las que lo forman. En particular esto es necesario si deseamos estudiar los modos de reversión magnética. En este caso es necesario incluir cada uno de los momentos magnéticos que forman parte del sistema, es decir, debemos incluir típicamente del orden de 10^8 momentos magnéticos, y considerar las interacciones de corto y largo alcance entre ellos. El considerar las interacciones de largo alcance entre un gran número de momentos magnéticos hace que el tiempo computacional sea irrealizable con las capacidades actuales (por ejemplo, computador Intel Core 2 Duo con 4 GiB en RAM), pues este se incrementa con el cuadrado del número de partículas en el caso de la interacción dipolar. Es por esto que el contar con una técnica que permita reducir el número de elementos del sistema es de suma importancia para el estudio de dichos materiales.

2.6.2. Técnica de escalamiento de un diagrama de fase magnético

Esta técnica, que a continuación describiremos, fue descrita el año 2002 por J. d'Albuquerque e Castro et al [27]. El problema que se plantearon fue estudiar el diagrama de fase magnético de un cilindro de cobalto en función de su diámetro y altura. Para este diagrama se considerarían tres posibles configuraciones: Un dominio magnético en el plano del cilindro, un dominio magnético perpendicular al plano del cilindro y una configuración del tipo vórtice. En este estudio los autores observaron que distintos diagramas de fase obtenidos modificando la constante de intercambio de la forma $J' = JX$, donde X es una constante menor que 1, convergían a un mismo diagrama de fase magnético si se escalaba el largo, L , y el diámetro, d del cilindro, mediante la relación:

$$d' = dX^n, \tag{2.14}$$

$$L' = LX^\eta, \quad (2.15)$$

donde $\eta = 0,55$. Estas relaciones de escalamiento permiten mantener sus propiedades magnéticas intactas. La razón de esto reside en que cuando uno disminuye el tamaño del sistema disminuye la energía dipolar de este, por lo que debe disminuir la energía de intercambio de forma de mantener la relación entre energía dipolar y de intercambio intacta. La relaciones 2.14 y 2.16 se pueden traducir a cualquier dimensión de longitud del material. Esto es,

$$(\text{Longitud})' = \text{Longitud}X^\eta. \quad (2.16)$$

En un trabajo posterior, Landeros et al [28] muestran que existe una relación entre X y η para un cilindro magnético determinado. Esta relación hace que η aumente cuando X disminuye. Cuando X es del orden de 10^{-3} se debe de utilizar $\eta = 0,56$.

2.6.3. Fast Montecarlo

La técnica que combina simulaciones de Monte Carlo con la técnica de escalamiento, denominada Fast Monte Carlo, fue presentada por P. Vargas et al [3] mediante la resolución de un problema estándar que consiste en determinar el tamaño máximo para el que una partícula magnética cúbica con un eje fácil paralelo a una de las direcciones del cubo presente un monodominio magnético como estado de menor energía.

Simulación Monte Carlo (Algoritmo de Metropolis)

Las simulaciones Monte Carlo se emplean para explorar un espacio de fase mediante movimientos aleatorios. En 1953, Nicholas Metropolis et al [34] proponen un nuevo procedimiento muestral en el que incorpora la temperatura.

El Algoritmo de Metropolis es un proceso markoviano en el cual se construyen pasos aleatorios de tal forma que la probabilidad de visitar un punto particular \vec{r}^N es proporcional al factor de Boltzmann $\exp(-\beta E(\vec{r}^N))$ [35]. En nuestro caso hacemos lo siguiente:

1. Se selecciona una partícula al azar, por ejemplo la partícula i , y se calcula su energía $E_1 = E(\vec{m}_i)$.
2. Se modifica la dirección del momento magnético de la partícula seleccionada i al azar. Luego se calcula su energía $E_2 = E(\vec{m}'_i)$.
3. Se acepta el cambio de \vec{m}_i a \vec{m}'_i si la energía E_2 es menor que E_1 . También se acepta el cambio de \vec{m}_i a \vec{m}'_i si E_2 es mayor que E_1 si y solo si $\exp(-\beta(E_2 - E_1))$ es mayor o igual a ε . El valor de ε se obtiene de un número aleatorio que va entre 0 y 1. Para otro caso se rechaza el cambio, es decir, se conserva \vec{m}_i .

En el desarrollo de esta tesis se utilizará la nominación paso de Monte Carlo (MCS), el cual corresponde a un número de selecciones aleatorias de la dirección de los momentos magnéticos igual al número N de momentos magnéticos que tiene el sistema en estudio.

Temperatura

Un parámetro importante a considerar es la temperatura, pues los experimentos con los que compararemos nuestros resultados se realizan a temperatura ambiente, es decir, a $T = 300$ K. Este parámetro no fue considerado en la formulación original presentada por d'Albuquerque e Castro et al [27]. Cuando se escala el sistema con el fin de conservar las propiedades magnéticas, las barreras de energías del sistema disminuyen, esto quiere decir que la transición entre estados es afectada al momento de escalar. Esto hace que la

temperatura también deba ser escalada. El problema de cómo tratar la temperatura es un problema abierto, pero Bahiana et al [4] dieron una solución parcial al problema. Ellos plantearon que en la vecindad de cada mínimo local las transiciones están reguladas por las barreras de energías de la forma $K_e V_e$, donde K_e es la constante de anisotropía efectiva que considera la contribución de todos los tipos de energía presentes en el sistema y V_e es el volumen de la partícula. De esta forma se puede plantear que las transiciones que son activadas de forma térmica dependen de la temperatura de bloqueo $T_B \propto K_e V_e$ [36]. Esto último nos da cuenta de la relación entre temperatura y tamaño del sistema. Entonces, si queremos escalar el sistema de tal forma que los procesos de activación térmica queden invariantes, debemos escalar la temperatura de la forma:

$$T' = TX^{3\eta}. \quad (2.17)$$

Capítulo 3

Modos de reversión en arreglos de nanohilos magnéticos de Níquel

3.1. Introducción

Durante los últimos años se ha enfocado una gran atención en el estudio de arreglos regulares de partículas magnéticas con dimensiones en el rango de los nanómetros. Estos estudios han sido fomentados por las potenciales aplicaciones de estas partículas en dispositivos de memorias magnéticas no volátiles o de sensores de campos magnéticos de muy alta resolución [1]. Entre los sistemas estudiados se deben destacar los arreglos regulares discretos de elementos magnéticos, tales como hilos, anillos o puntos, los que han sido propuestos como una nueva generación de medios de almacenamiento magnético de ultra alta densidad (Tbi/in^2) [2].

Una gran cantidad de estudios experimentales y teóricos han mostrado que existen diversas variables que influyen en el comportamiento magnético

del sistema (como estabilidad magnética y modos de reversión), tales como la geometría, anisotropía y las interacciones entre las partículas que forman el sistema. Estos factores son relevantes a la hora de entender e interpretar resultados experimentales.

El estudio de los efectos de la interacción entre partículas magnéticas es en general complicado ya que el campo dipolar que experimenta una particular depende del estado de la magnetización de todos los otros elementos. Por lo tanto, el modelamiento de sistemas con muchas partículas está a menudo sujeto a grandes simplificaciones, como por ejemplo, considerar que cada elemento magnético del arreglo es un solo monodominio. En el caso específico de hilos, Sampaio *et al* [37] modelaron un arreglo unidimensional de microhilos asumiendo que cada uno de ellos se comporta como un momento magnético tipo Ising, en donde la anisotropía de forma está representada por un campo de anisotropía. Con dicho modelo ellos obtuvieron, mediante simulaciones Monte Carlo, curvas de histéresis con alguna de las características observadas en los experimentos. Sin embargo, los parámetros usados para dichas simulaciones no se comparan con los valores reales medidos. Este mismo modelo usó Knobel *et al* [38] con la salvedad de que estudio arreglos bidimensionales y considerando que S_i toma los valores entre -1 y 1 . En este caso, los momentos magnéticos tenían la posibilidad de apuntar en cualquier dirección sobre el plano, y la interacción dipolar ha sido directamente calculada, pero aun así no consideran los efectos de considerar la estructura interna del hilo, como también considerar los tamaños del hilo. Escrig *et al* presentaron en la referencia [39] un modelo diferente, considerando la interacción dipolar entre hilos a partir de un modelo micromagnético, obteniendo valores para la remanencia y la coercividad muy cercanos a los valores experimentales. Sin embargo, ninguno de los modelos descritos considera una magnetización no uniforme dentro del hilo, ni estudian la estabilidad y la forma de reversión de

la magnetización en estos sistemas. La introducción de los grados de libertad internos permiten mapear los campos en la vecindad del hilo e identificar claramente los modos de reversión [40]. Los modelos utilizados para describir hilos con una magnetización no uniforme están basados esencialmente en modelos micromagnéticos [40, 41, 42], modelo validado en sistemas de dimensiones micrométricas, pero cuya validez en sistemas nanométricos no ha sido demostrada.

En este capítulo desarrollaremos simulaciones Monte Carlo para un arreglo de nanohilos en el cual la estructura interna de cada hilo es tomada en cuenta. Nos enfocaremos en arreglos de nanohilos del tipo de los generados por electrodeposición de níquel en poros de una membrana de alúmina [19]. Esta técnica de fabricación produce arreglos de nanohilos hexagonales con un orden de largo alcance, con un buen control de la distancia entre los nanohilos (D), como también de sus diámetros (d) y largo (l). Los valores típicos para el diámetro son de entre 10 nm y 100 nm. Los largos van desde 0,1 μm hasta 1 μm y la distancia de separación va desde 30 nm hasta 100 nm. Los hilos más investigados son aquellos que tienen una razón de aspecto $l/d > 10$, esto con el fin de que su alta anisotropía de forma favorezca la estabilidad de grabación de información y puedan ser utilizados como un bit. Se ha observado de forma experimental que el campo coercitivo depende fuertemente de la razón d/D , así como también que los procesos de reversión dependen, en alguna medida, de las interacciones magnetostáticas entre hilos [43]. Esto se ha evidenciado en diversos experimentos en los cuales se han medido curvas de histéresis para membranas con diferentes densidades de empaquetamiento [19, 43, 44].

Si quisiéramos realizar simulaciones numéricas considerando momentos magnéticos atómicos, tomando en cuenta que el número de átomos en cada hilo es del orden de 10^8 , la capacidad computacional requerida está fuera de

las existentes actualmente. Esto se debe a que, como ya se dijo, la interacción dipolar es de largo alcance, esto es, considera todos los pares de momentos magnéticos en un hilo. Esto hace que el cálculo sea imposible y sea necesario utilizar algún método alternativo al cálculo directo.

Para eludir esta dificultad, en esta tesis utilizamos una técnica de escalamiento desarrollada por d'Albuquerque *et al* [27], la cual fue aplicada a la obtención de diagramas de fase magnéticos de partículas cilíndricas. Esta técnica, explicitada en el capítulo 2, permite reducir el número de partículas a un valor razonable que permita realizar las simulaciones numéricas considerando la interacción dipolar entre todos los pares de momentos magnéticos del hilo [3]. Mediante simulaciones Monte Carlo se obtuvieron las curvas de histéresis de arreglos con diferentes distancias entre hilos. A partir de ellas investigamos el comportamiento de la coercividad y los mecanismos de reversión en estos sistemas.

3.2. Modelo

Nuestro interés en este trabajo es modelar un arreglo de nanohilos considerando la estructura interna de cada hilo. Sin embargo, cada arreglo considera del orden de millones de nanohilos, con lo que, aun utilizando la técnica de escalamiento, el cálculo resulta imposible. Con el fin de obtener información sobre el proceso de reversión tomando en cuenta la interacción con los hilos vecinos y al mismo tiempo, utilizar un tiempo computacional razonable, nos hemos enfocado en estudiar una celda unitaria de un arreglo hexagonal. Esta celda consta de siete hilos, en donde seis forman un hexágono y el séptimo está en el centro, ver figura 3.1. En este trabajo nos focalizamos en el comportamiento del hilo central, el cual tiene interacciones con sus seis primeros vecinos. Este esquema representa un elemento típico de un arreglo

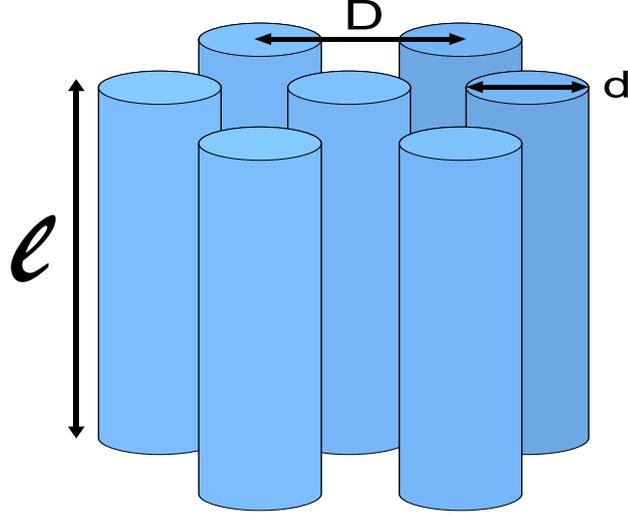


Figura 3.1: Celda que consta de siete hilos, en donde seis forman un hexágono y el séptimo está en el centro. En este trabajo nos focalizamos en el comportamiento del hilo central.

microscópico.

La energía interna E_{tot} de un arreglo de hilos con N momentos magnéticos está dada por:

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N (E_{ij} - J\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) + E_K + E_H, \quad (3.1)$$

donde E_{ij} es la energía dipolar entre los momentos i y j dada por:

$$E_{ij} = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{n}_{ij})}{r_{ij}^3}. \quad (3.2)$$

r_{ij} es la distancia entre los momentos magnéticos \vec{m}_i y \vec{m}_j y \hat{n}_{ij} es el vector unitario a lo largo de la dirección que conecta a estos dos momentos magnéticos. J es la constante de intercambio entre los primeros vecinos.

E_K es el termino de la anisotropía cristalina cúbica que puede ser escrita como $E_K = K \sum_{i=1}^N (\alpha_i^2 \beta_i^2 + \beta_i^2 \gamma_i^2 + \gamma_i^2 \alpha_i^2)$ donde $(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$ son los cosenos direccionales de \vec{m}_i referido a los ejes del cubo [45], y $E_H = - \sum_{i=1}^N (\vec{m}_i \cdot \vec{B}_a)$ es la contribución del campo magnético externo.

Para comparar nuestras simulaciones con resultados experimentales en sistemas de nanohilos de níquel, hemos considerado $|\vec{m}_i| = m = 0,615 \mu_B$, una constante de red $a_0 = 3,52 \text{ \AA}$, $K = 2 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$, y $J = 1600 \text{ kOe}/\mu_B$ [45]. Los hilos tienen diámetros $d = 30 \text{ nm}$, longitud $l = 1 \mu\text{m}$ han sido construidos a lo largo de la dirección [110] de una red fcc que comprende 6×10^9 átomos. En nuestras simulaciones hemos considerado una temperatura $T = 300 \text{ K}$. Para reducir el número de átomos interactuantes, hacemos uso de la técnica de escalamiento ya mencionada utilizando $X = 8 \times 10^{-4}$ y de $\eta \approx 0,56$. Con estos valores obtenemos un hilo de 504 momentos magnéticos y un número total de momentos magnéticos de 3528, lo cual es perfectamente manejable con las capacidades computacionales actuales.

Las curvas de histéresis se simulan con un campo externo aplicado en la dirección del eje del hilo. El estado inicial tiene un campo externo de 2,0 kOe, mayor que el campo de saturación. En otras palabras, la configuración inicial del sistema considera a todos los momentos magnéticos alineados con el campo magnético externo. Los estados siguientes fueron obteniéndose mediante una disminución lineal del campo externo a una tasa de 300 pasos de Monte Carlo por cada 0,01 kOe. Con esta tasa, el ir desde el campo de saturación hasta el campo coercitivo toma alrededor de 120,000 pasos de Monte Carlo. Los valores de coercividad que se muestran a continuación corresponden a un promedio de un mínimo de 10 realizaciones independientes.

3.3. Resultados y Discusión

La figura 3.2 muestra dos curvas de histéresis, una para un sistema con una constante de red (distancia de separación entre los nanohilos) infinita, y la otra para el nanohilo central de una celda unitaria con constante de red $D = 40$ nm. De estas curvas se evidencia que la interacción afecta el mecanismo de reversión, modificando no sólo la coercividad, sino también la forma de la curva. La curva de histéresis para el nanohilo no interactuante presenta una cuadratura del 100 %, mientras que la del nanohilo altamente interactuante, tiene una cuadratura del 45 %. Cabe señalar que todas las curvas de celdas con constante de red mayor que 100 nm coinciden con la curva de histéresis del hilo no interactuante. también se muestra el caso para $D = 70$ nm donde la cuadratura es de un 98 %. Resultados similares han sido encontrado por otros autores, como Samwell *et al* [51] e Yshii *et al* [52]. Ambos trabajos reportan cálculos analíticos considerando que las interacciones magnetostáticas son la única causa de la inclinación en la curva de histéresis. Los resultados reportados por Sorop *et al* [53] para nanohilos de hierro en nanoporos de un membrana de alúmina refuerzan esta idea. Ellos examinan la morfología del hilo, como también varían su temperatura, descartando que estos factores sean responsables de la inclinación de la curva de histéresis. La cuadratura de la curva de histéresis ha sido también examinada por Hwang *et al* [54], quien ajustó curvas experimentales para arreglos cilíndricos de partículas de Ni con un modelo determinado en la que los cilindros son representados como un solo momento magnético. A partir de esto, concluyen que la inclinación observada es debido a la interacción dipolar entre partículas.

El efecto de la variación de la separación entre los hilos en la coercividad puede ser examinado en la figura 3.3, en la cual se muestra la coercividad en

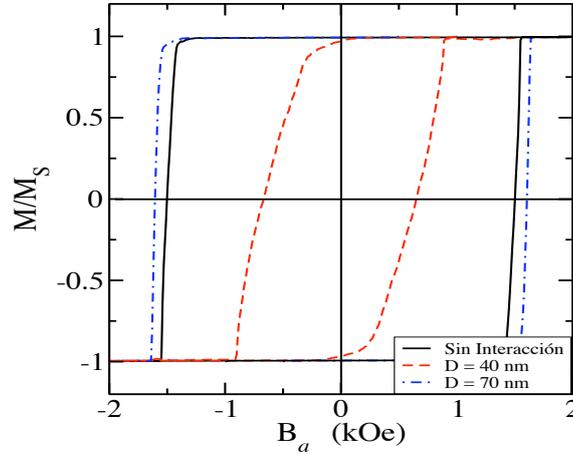


Figura 3.2: Curvas de histéresis para un nanohilo aislado, y para el hilo central de un arreglo hexagonal de siete hilos con constante de red $D = 40$ nm y 70 nm.

función del parámetro d/D . Los resultados ilustrados se han obtenido dejando fijo el diámetro $d = 30$ nm, variando la constante de red entre 150 nm (sistema no interactuante) hasta $D = 40$ nm (sistema fuertemente interactuante). Para facilitar la interpretación, el valor obtenido de la coercividad para un nanohilo no interactuante se representa por la línea horizontal. Se puede observar que para constantes de red grandes, mayores que 100 nm, la coercividad coincide con el límite no interactuante. Por otro lado se observa una zona interactuante, caracterizada por bajos valores de la coercividad, mostrando que la interacción con los restantes hilos de la red ayuda a que la magnetización del hilo central revierta. En la transición entre ambos regímenes aparece un máximo en la coercividad (puede verse también en la figura 3.2). Como en nuestras curvas de histéresis consideramos sólo la reversión del hilo central, la Figura 3.3 es un reflejo del orden de reversión del conjunto de hilos en la celda. En el límite no interactuante o distancias de separación $D > 100$ nm, todos los nanohilos de la celda revierten básicamente en el mis-

mo instante. Para constantes de red entre 70 nm y 100 nm, el nanohilo del centro es el último en revertir, y para constantes de red entre 60 nm y 40 nm, el nanohilo del centro es el primero en revertir. Este aumento en la coercividad ha sido también reportado por Hertel [40], quien realizó simulaciones micro-magnéticas de nanohilos en arreglos hexagonales con parámetros geométricos fijos. El sistema investigado por Hertel está compuesto por nanohilos de longitud $1 \mu\text{m}$, $d = 40 \text{ nm}$ y $D = 100 \text{ nm}$, con una razón $d/D = 0,4$, la cual está en la región donde se encuentra el máximo de la coercividad. Hertel examinó el impacto de incrementar el número de nanohilos en el arreglo, como una forma de aumentar la interacción entre hilos y observó que la reversión de algunos de ellos es debida a que el campo desmagnetizante de alambres vecinos se suma al campo externo, originando un campo más alto, al cual los momentos magnéticos están efectivamente expuestos, que en el caso de momentos de un hilo no interactuante. Por otra parte, los nanohilos que mantienen una magnetización antiparalela al campo están enfrentándose con el campo desmagnetizante de los hilos que ya revirtieron, reduciendo su campo local. El proceso de reversión es regulado en primer lugar por la energía dipolar interna del hilo, E_i . Esta energía corresponde a la interacción dipolar entre los momentos magnéticos que están dentro del hilo.

La Figura 3.4 muestra el comportamiento de E_i a lo largo de la curva de histéresis para un nanohilo no interactuante como también para el hilo central de redes con constantes $D = 40 \text{ nm}$, 70 nm y 120 nm . Para $D > 70 \text{ nm}$ se observa que la reversión es rápida, con un máximo en la curva de energía en el valor del campo coercitivo. Para $D = 40 \text{ nm}$, la reversión comienza cercana al campo cero y tiene una duración aproximadamente cinco veces mayor.

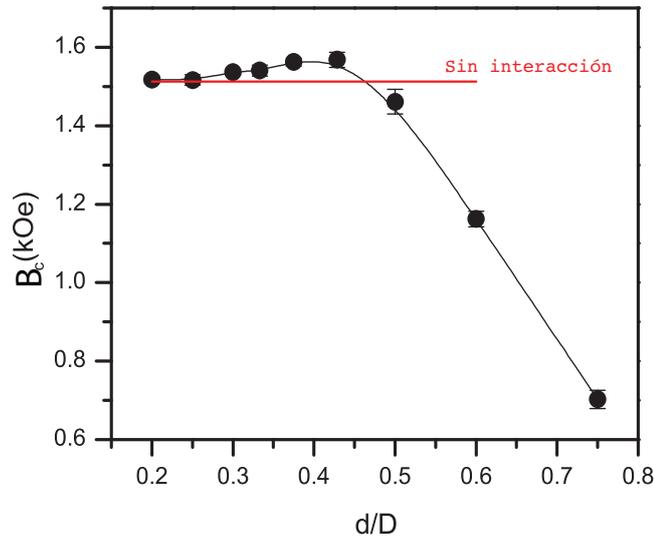


Figura 3.3: Coercividad del nanohilo central en función de la constante de la red. Los hilos tienen diámetro 30 nm y longitud 1000 nm. La línea sólida es una guía

La complejidad del proceso de reversión para arreglos altamente interactuantes es evidente cuando se observa E_i para cada nanohilo en las distintas distancia de separación a lo largo de la curva de histéresis. La figura 3.5 en la parte superior muestra E_i para el nanohilo del centro, mientras que la parte inferior muestra esta energía para los otros seis hilos que lo rodean para constantes de red de 40 nm, 70 nm y 120 nm. Para $D = 120$ nm, el proceso consiste de una secuencia de reversiones rápidas en un intervalo de 0,3 kOe, mostrando que los hilos revierten casi al mismo instante. Gráficos similares para otras semillas del cálculo de Monte Carlo muestran una situación estadísticamente equivalente, evidenciando que los siete hilos son equivalente y revierten casi en el mismo instante. Para $D = 70$ nm se observa que el intervalo de reversión es de 0,5 kOe, y es posible identificar los procesos de

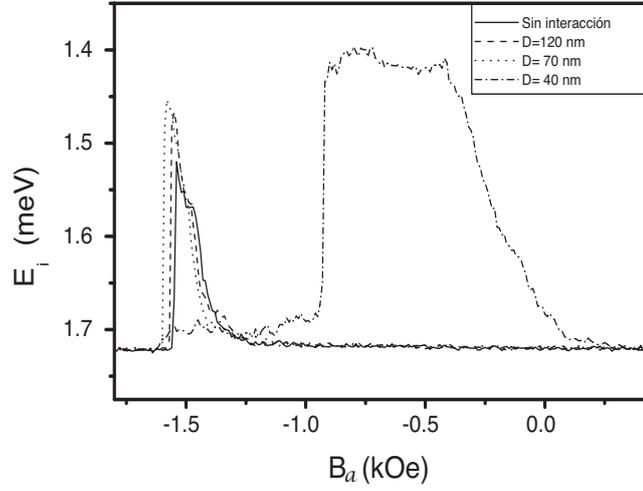


Figura 3.4: Energía dipolar interna del nanohilo central a lo largo de la curva de histéresis. Las curvas son para constantes de red $D = 40$ nm, 70 nm, 120 nm e infinito, que corresponde a un nanohilo aislado.

reversión individuales, evidenciando que el hilo central es el último hilo que revierte. El caso de $D = 40$ nm es claramente diferente. Para esta distancia, cada curva de reversión tiene una estructura complicada, con amplias regiones de solapamiento. También los máximos son anchos, y ocurren en un intervalo de 1,6 kOe, mostrando una reversión lenta, en la cual solamente la reversión del hilo del centro puede separarse del resto, actuando dicha reversión como detonante de las reversiones de los hilos más externos.

Examinando la estructura interna de cada hilo, notamos otros efectos de la interacción. La reversión en hilos aislados ocurre a partir de la nucleación de paredes de dominio en los extremos del hilo, las que se propagan y se unen cerca del centro, tal como se observa en simulaciones micromagnéticas. En el arreglo de $D = 40$ nm observamos también la nucleación de paredes de domi-

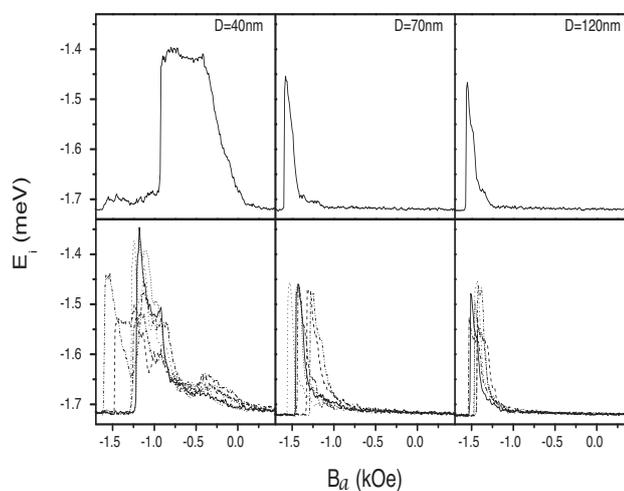


Figura 3.5: Energía dipolar interna de los siete nanohilos a lo largo de la curva de histéresis. En la parte superior se muestra la energía del hilo central, en la inferior la de los seis nanohilos restantes.

nio en el centro del hilo, las que se propagan hacia los extremos, mezclándose con las paredes provenientes de los extremos. La figura 3.6 muestra dos instantes del proceso de reversión de dicho arreglo. En la figura 3.6(a) el hilo central ha comenzado a revertir y tiene dos paredes de dominio viajando hacia el centro. Una vista más tarde se muestra en la figura 3.6(b), en la cual tres hilos ya han revertido y dos tienen paredes nucleadas en el centro.

Para entender mejor la aparición del máximo para $D = 70$ nm, se debe de estudiar la estabilidad relativa de las configuraciones posibles para la celda. Para este propósito, hemos calculado la magnetización y la energía de un arreglo hexagonal en ausencia de campo externo, asumiendo que todos los hilos están saturados con una magnetización a lo largo del eje del hilo. Para $D = 40$ nm, la energía dipolar del hilo del centro es $-1,55$ meV (La energía

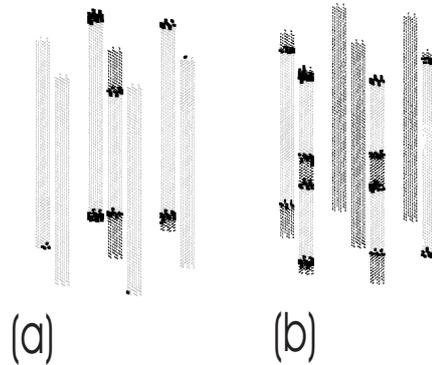


Figura 3.6: Proceso de reversión en un arreglo con $D = 40$ nm a lo largo de una curva de histéresis, para dos semillas distintas. Los momentos magnéticos alineados de forma opuesta al campo son representados con un gris brillante, mientras los que momentos que han revertido aparecen en un gris oscuro. La regiones negras representan las paredes de dominios. (a) La reversión comienza en el hilo del centro, donde las paredes de dominios se forman en los extremos y e propaga hacia el centro. (b) En dos de los hilos de los bordes de la celda se observa una formación de paredes de dominio en la parte central del hilo. Estas paredes se propagan hacia los extremos juntándose con las paredes que se formaron en las puntas.

de intercambio se puede omitir debido a que cuando el sistema está saturado, esta energía contribuye con una constante) mientras que la energía de los hilos que rodean al del centro es de $-1,60$ meV. Por ende, el hilo del centro tiende a ser más inestable, ya que tiene una energía mayor. De lo ultimo se desprende que el hilo del centro es el primero en revertir (Figura 3.7(a)). Para $D = 70$ nm, la energía dipolar para el hilo del centro es de $-1,66$ meV y $-1,67$ meV para los otros hilos. En este caso, la energía del hilo del centro es muy cercana a la de los otros, haciéndolos prácticamente igualmente estables. Además, en el momento que comienza la reversión, los momentos magnéticos

de las puntas de los hilos vecinos al hilo central comienzan a tener componentes transversales al eje de los hilos, haciendo que el hilo central sea el más estable. El proceso de reversión del sistema comienza fácil y simultáneamente en dos hilos externos opuestos en la red, separados por una distancia $2D$. Esta reversión deja el sistema en una configuración intermedia muy favorable para la minimización de su energía, pues presenta 6 enlaces antiferro para los primeros vecinos y 4 enlaces antiferro para segundos vecinos. La reversión continúa con los otros dos pares de hilos externos opuestos, siendo entonces el hilo central el último en revertir y mostrando, por consiguiente, una coercividad que es aun mayor que la de un sistema no interactuante (Figura 3.7(b)). Finalmente para $D > 120$ nm, el arreglo puede ser considerado como no interactuante, pudiendo todos los hilos revertir en el mismo instante pues en nuestro modelo han sido considerados idénticos (Figura 3.7(c)).

3.4. Conclusión

En este capítulo se ha estudiado la coercividad y la reversión de un arreglo hexagonal de nanohilos mediante una celda. Este estudio se desarrolló mediante simulaciones numéricas, utilizando una combinación del método Monte Carlo y la técnica de escalamiento, la que permitió considerar la estructura interna de cada nanohilo. Con el esquema propuesto para la simulación, se logró reproducir diversos resultados experimentales para arreglos hexagonales de níquel, como la disminución de la coercividad y remanencia cuando la interacción entre los nanohilos aumenta [50]. La inclinación que presenta la curva de histéresis puede ser atribuida a la interacción entre los hilos, resultado apoyado por otras simulaciones y cálculos analíticos de otros autores. La existencia del máximo en nuestra curva de coercividad, como muestra la

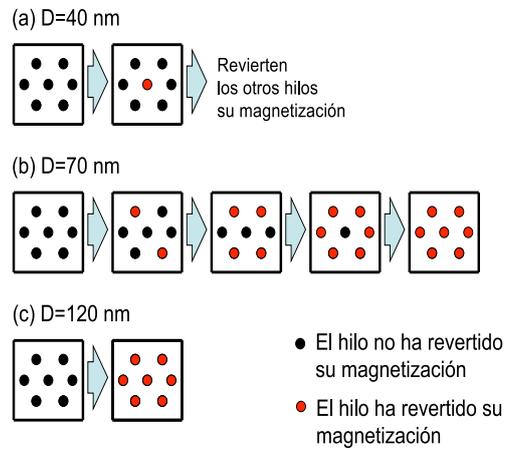


Figura 3.7: Esquema del proceso de reversión de la magnetización para el sistema estudiado. (a) La distancia de separación entre hilos es de 40 nm. Se observa que el primer hilo en revertir es el del centro. (b) La distancia de separación es de 70 nm. Se observa que el ultimo hilo en revertir es el hilo del centro. (c) La distancia de separación es de 120 nm. Se observa que los hilos revierten todos por iguales.

figura 3.3, viene dada por un orden particular de la reversión de los hilos que está determinada por la interacción dipolar entre ellos. Creemos que el máximo observado en la curva experimental de la referencia [55] está originado por un proceso similar. El desorden posicional de los hilos, el cual está presente siempre en sistemas macroscópicos reales, puede crear celdas locales generando el bloqueo temporal de algunos hilos más internos del arreglo. Como nuestros hilos no poseen desorden interno, podemos descartar la influencia de dicho efecto en el comportamiento de la coercividad. Además, nuestros resultados muestran que los procesos de reversión en arreglos de hilos fuertemente interactuantes son más lentos que los no interactuantes.

Capítulo 4

Propagación de una pared de dominio transversal en un nanohilo homogéneo de Níquel.

4.1. Introducción

Los procesos de reversión guiados por el campo en nano y microhilos han sido extensamente estudiados con una variedad de técnicas teóricas y experimentales debido a su relación con el desarrollo de grabación magnética y dispositivos basados en spintrónica [15]. Los hilos considerados en la literatura pueden ser clasificados acorde a sus parámetros geométricos (diámetros del orden de los mili o nanómetros y razón de aspecto), material que los forma (materiales puros o aleaciones), e interacciones (aislados o empaquetados en arreglos densos). Todas estas características pueden influir el proceso de reversión total del hilo, dificultando evidenciar los principios básicos tras de los comportamientos observados.

A pesar de que los procesos de reversión en nanohilos han sido inves-

tigados analíticamente en trabajos fechados desde 1958 [56], los desarrollos experimentales sólo recién han sido concretados desde apenas una década, debido a recientes avances en las técnicas de fabricación de material nanoestructurado y métodos de medición de magnetización débil [57]. Wernsdorfer *et al.* [58, 59] estudiaron el comportamiento del campo de nucleación en un nanohilo de Ni, como función de la temperatura y la tasa de barrido del campo, en hilos con diámetros que van entre 40 a 100 nm y longitudes de hasta 5 μm . Ellos observaron que en hilos delgados el volumen de activación estimado para la reversión era dos ordenes de magnitud menor que el volumen del hilo y concluyeron que la reversión de la magnetización es causada por la nucleación de la reversión de una fracción del hilo, la que se propaga de forma rápida a lo largo de la muestra. La nucleación de las paredes de dominio fue también observada por Paulus *et al.* [60] en arreglos de nanohilos de níquel no interactuantes con diámetros del rango de 6-50 nm.

El modelamiento teórico de estos sistemas no es trivial, debido a que se debe incluir la estructura interna del hilo, lo que implica trabajar con la interacción dipolar, de largo alcance, además de todas las otras interacciones presentes. Braun [31, 32, 33] realizó una detallada investigación analítica de la tasa de nucleación y de las barreras de energía involucradas en el proceso de reversión de nanohilos uniformes. Su principal resultado fue que, en hilos cuyo largo excede el ancho de una pared de dominio estática, la reversión de la magnetización ocurre mediante la formación de un par de paredes de dominio con quiralidades opuestas. Esto último es conocido como par solitón y antisolitón. La energía de activación de estos es proporcional al área transversal del hilo, y su formación es responsable de valores de coercividad mucho menores que los predichos asumiendo una rotación uniforme. Por otro lado, Hertel y Kirschner [41] desarrollaron simulaciones micromagnéticas en hilos de Ni para investigar la estructura de la pared durante la reversión. Los

diámetros que han empleado van desde 30 nm a 60 nm con una longitud de 1 μm . Considerando un hilo con forma de cono, con un diámetro mínimo de 30 nm y un diámetro máximo de 60 nm., observaron como el modo de reversión cambia al propagarse desde un modo corkscrew a modo curling cuando el radio del hilo excede un valor crítico. Wieser *et al.* también observaron este comportamiento en función del diámetro, reportando la propagación de paredes de tipo transversal y de vórtice. [61]. Forster *et al.* observó este comportamiento en nanohilos de Cobalto [30], encontrando también que la velocidad de propagación de la pared de dominio es proporcional al campo magnético aplicado. Por otra parte, Varga *et al.* estudiaron el mecanismo de nucleación y propagación de una única pared de dominio como función de la temperatura en un microhilo de Fe amorfo biestable con una única estructura de dominio simple. A partir de un análisis cuantitativo de las características de la pared, ellos propusieron un mecanismo de amortiguamiento que domina en el régimen de bajas temperaturas. [62]

En el capítulo anterior se estudió, mediante una técnica de escalamiento [27, 3], el mecanismo de reversión de un arreglo hexagonal de nanohilos. Como función de la interacción dipolar entre los hilos, se observaron diferentes modos de reversión. En particular, se identificó la nucleación de paredes de dominio como el principal mecanismo para el proceso de reversión de la magnetización. En este capítulo consideraremos un sistema más simple con el fin de estudiar los fundamentos de los procesos de reversión. Para esto consideramos un nanohilo de níquel sujeto a un campo magnético aplicado. Además, debido a que el níquel posee una estructura fcc, su anisotropía cristalina es muy pequeña y será despreciada. Nuestro foco es estudiar la nucleación y propagación de paredes de dominios como función del campo aplicado y analizar su dinámica en términos de un modelo de relajación clásica [63] para interfaces dinámicas. Las simulaciones muestran una aparición de

un régimen no lineal, precursor de otro régimen en el cual aparecen múltiples paredes nucleando en el mismo instante.

4.2. Modelo

Para guiar la discusión y mantener una perspectiva concreta, nos enfocaremos en un nanohilo de Níquel con diámetros de $d = 30$ nm y longitud de $\ell = 500$ nm. Este hilo está construido a lo largo de la dirección [001] de una red fcc con parámetros de red de $a_0 = 3,52 \text{ \AA}$ a una temperatura de $T = 300$ K. La energía de cada momento del hilo, \vec{m} , puede ser escrita como

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B}_{eff}, \quad (4.1)$$

en donde \vec{B}_{eff} es el campo efectivo en el que incluyen todas las contribuciones del campo aplicado (\vec{B}_a), de intercambio (\vec{B}_x), y de la interacción dipolar (\vec{B}_d), en la forma

$$\begin{aligned} \vec{B}_{eff} &= \vec{B}_a + \vec{B}_x + \vec{B}_d \\ &= \vec{B}_a + J \sum_{i \in \{nn\}} \vec{m}_i + \sum_i \frac{3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_i)\hat{n}_i - \vec{m}_i}{r_i^3}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde J es la constante de intercambio, $\{nn\}$ es el conjunto de primeros vecinos, r_i la distancia al átomo i th y \hat{n}_i el vector unitario a lo largo de \vec{r}_i . El valor de saturación de \vec{m} usado es $m = 0,615 \mu_B$ y la constante de acoplamiento de intercambio utilizada es $J = 1600 \text{ kOe}/\mu_B$ [45, 64]. Para reducir el número de átomos interactuantes en un hilo de estas dimensiones, hacemos uso de la técnica de escalamiento ya presentada en el capítulo 2. Los valores utilizados en el escalamiento son $X = 4 \times 10^{-3}$ y de $\eta \approx 0,56$. Con estos valores tenemos un hilo equivalente con un número total de 2835 momentos magnéticos, el cual es perfectamente tratable con las capacidades de cálculo de que disponemos.

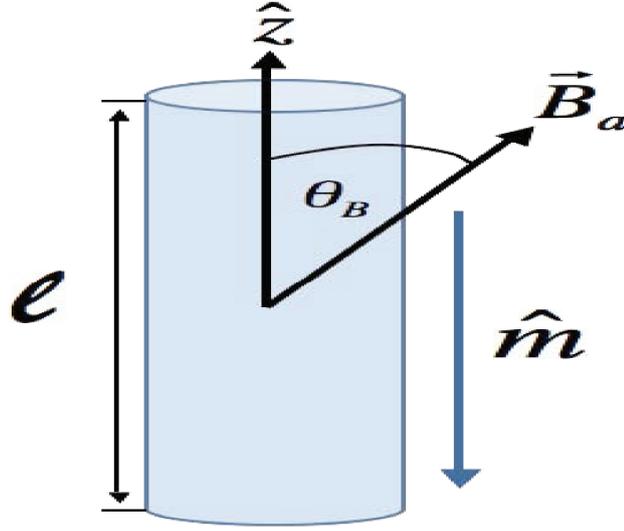


Figura 4.1: Definición de la geometría del sistema. La orientación de la magnetización y del campo magnético corresponden a una condición inicial típica.

Las simulaciones Monte Carlo se realizaron a 300 K utilizando el algoritmo usual de Metrópolis. Los resultados que se muestran en este trabajo corresponden a un promedio de 10 a 20 realizaciones independientes.

4.3. Resultados y discusión

La geometría usada en la simulación se ilustra en la figura 4.1. En su estado inicial el hilo presenta una magnetización saturada en la dirección $-z$ y existe un campo magnético externo que forma un ángulo θ_B con respecto al eje del hilo.

Debido a los fuertes campos desmagnetizantes, la estructura en los extremos del hilo está formada usualmente por varios dominios de cierre. Si se

permite que relaje, la reversión de la magnetización puede ocurrir mediante la creación de un par de paredes de dominio en los extremos del nanohilo [4,66]. En un montaje experimental, esto puede afectar la medición del tiempo de propagación, en cuyo caso es conveniente inhibir la propagación de una de las paredes de dominio. Esto puede hacerse, por ejemplo, dejando un extremo del hilo fuera de la región en la cual se aplica el campo magnético [67], o bien induciendo la nucleación de una pared en una punta, incrementando el valor del campo en esa región. Nosotros usaremos el primer procedimiento descrito, inhibiendo la nucleación de una de las paredes al aplicar un campo $B_a = 0$ para los átomos de los últimos 12 nm. El proceso de reversión será monitoreado registrando los valores de $\mu_i(z) \equiv \bar{m}_i/m$, $i = x, y, z$, que son las componentes de los valores promedio de los momentos magnéticos relativas a sus valores de saturación. En algún rango de parámetros es posible identificar los dominios como regiones en las que $\mu_z(z) = \pm 1$ (realmente son cercanas a 1 o a -1 debido a las fluctuaciones térmicas presente en el sistema), separadas por una interfase o pared de dominio. La posición de la pared esta dada por z_w , y puede obtenerse por el máximo de $(1 - |\mu_z|)$ tal como lo indica la figura 4.2. En esta figura se muestra un caso particular en donde la pared está localizada en $z_w = 240$ nm y tiene un ancho igual a $\delta \approx 40$ nm. El ancho de la pared puede ser definido como el ancho de la región en donde μ_z tiene valores inferiores al 85 % del valor de saturación. Desde este punto de vista, uno reduce el problema de la reversión individual de cada momento magnético al del movimiento unidimensional de una pared de dominio.

Un parámetro importante es el ángulo de aplicación del campo externo θ_B . Dependiendo de su valor se pueden observar diferentes modos de reversión.

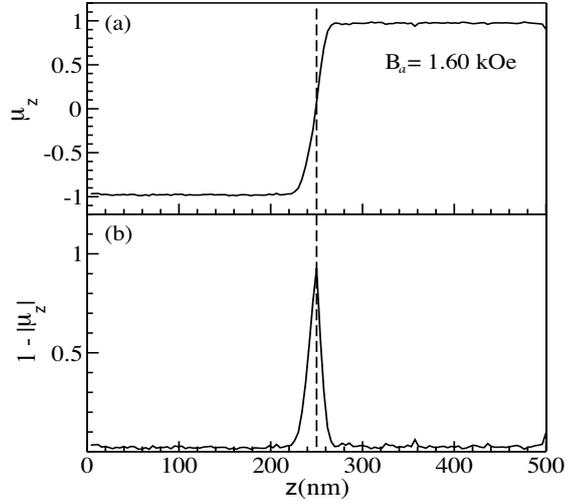


Figura 4.2: Perfil de magnetización típico para $B_a = 1,6$ kOe: (a) $\mu_z(z)$ y (b) $(1 - |\mu_z(z)|)$. En este caso es fácil identificar la pared de dominio centrada en $z_w = 250$ nm. La magnetización delante y detrás de la pared es homogénea, y el proceso de reversión puede ser descrito por medio de $z_w(t)$.

La figura 4.3 muestra los perfiles típicos de magnetización para $\theta_B = 0^\circ$, 15° y 30° obtenidos en dos instantes distintos del proceso de reversión. Para $\theta_B = 0^\circ$ (Fig. 4.3(a)), el proceso de reversión ocurre mediante el modo corkscrew [41] en el cual un grupo de momentos magnéticos, que forman una región de ancho finita, revierten su dirección a lo largo de un plano dado que contiene el eje del hilo. Este plano rota alrededor del eje del hilo a medida que la pared de domino se propaga, como puede verse por los perfiles de $\mu_x(z)$ y $\mu_y(z)$ en diferentes instantes de la trayectoria de la pared. En cambio, cuando $\theta_B \neq 0$ se tiene que las componentes xy del campo ejercen un torque sobre los momentos magnéticos, afectando de forma considerable el modo de reversión. En este caso, es posible identificar tres modos de reversión diferentes, dependiendo de la intensidad del campo y θ_B : corkscrew (Fig. 4.3 (a)), transversal (Fig. 4.3 (b)) y multidominio (Fig. 4.3 (c)). El modo de reversión transversal es

similar al modo corkscrew, pero en el primero la pared de dominio está sobre un plano fijo definido por la dirección del campo aplicado y el eje del nanohilo. En el modo de reversión de mutidominio hay dos o más paredes de dominio en el hilo propagándose simultáneamente.

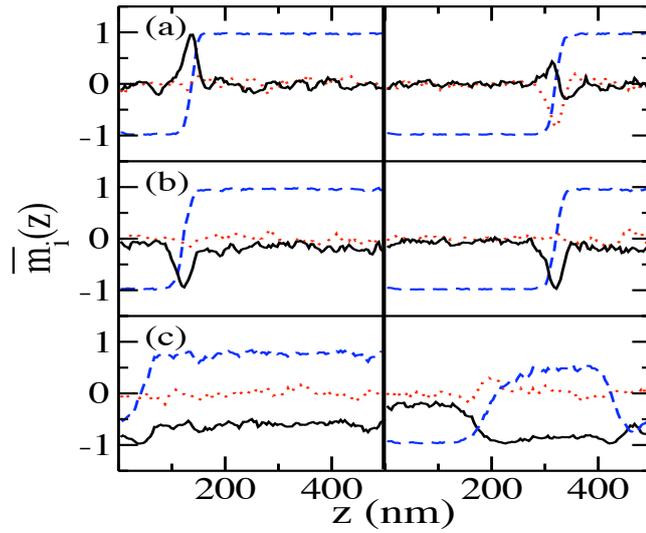


Figura 4.3: Instantáneas de los perfiles de la magnetización a lo largo del hilo en dos instantes diferentes del proceso de reversión, con $B_a = 1,6$ kOe. La línea de trazos ilustra \bar{m}_z , la de puntos ilustra \bar{m}_x , y la línea sólida muestra \bar{m}_y . La figura (a) corresponde $\theta_B = 0^\circ$, reversión que ocurre vía el modo corkscrew. Los perfiles de x e y cambian con el tiempo, indicando que el plano de la pared rota alrededor del eje z . La figura (b) corresponde a $\theta_B = 15^\circ$, y la reversión de la magnetización ocurre vía el modo transversal. El perfil de la magnetización presenta una forma constante en los distintos momentos. La figura (c), para $\theta_B = 30^\circ$, muestra una reversión con multidominios. La estructura de paredes se pierde durante la propagación debido a la formación de múltiples dominios a lo largo del hilo.

Aunque no corresponde a un estado de equilibrio, la configuración inicial puede permanecer por un tiempo debido a su grado de metaestabilidad para campos magnéticos débiles. Para estudiar esto definimos el tiempo de espera, τ , como el tiempo en la cual la magnetización del hilo ha decrecido a un 90% del valor de saturación para un campo externo fijo. Este tiempo será medido en pasos de Monte Carlo (MCS).

4.3.1. Propagación a $\theta_B = 0^\circ$

Examinaremos primero el efecto de la magnitud del campo sobre el tiempo de espera para la nucleación de la pared. La figura 4.4 muestra los valores de τ para diferentes valores del campo aplicado. A partir de ella podemos verificar que para campos menores que 1.3 kOe, la formación de la pared de dominio no es sólo difícil, debido al largo tiempo de espera involucrado, sino también es afectada extremadamente por las fluctuaciones térmicas. Para evitar largos tiempos de espera la nucleación de la pared es favorecida con la aplicación de un pulso de campo magnético mayor, de manera análoga a un procedimiento experimental utilizado y descrito por Geoffrey *et al.* [68] En nuestro caso, el pulso consistió en la aplicación de un campo alto de 2.0 kOe hasta que la pared se encontrase en la posición $z_w = 100$ nm. Luego la propagación sigue con un campo aplicado más débil, que corresponde al B_a indicado. Con este procedimiento estamos en condiciones de monitorear la propagación de la pared de dominio para campos de hasta 0.25 kOe. La figura 4.5 muestra un gráfico típico de z_w como función del tiempo, en pasos de MC, para $B_a = 1,6$ kOe. La velocidad de la pared puede ser calculada de forma directa mediante la pendiente de la curva, la cual en este caso resulta ser constante.

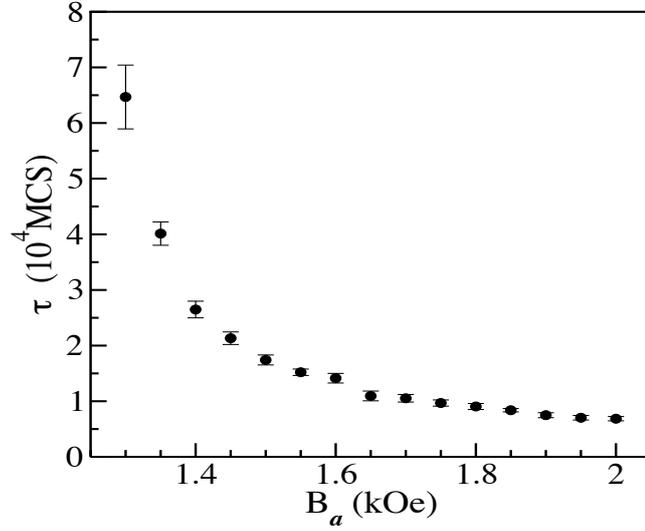


Figura 4.4: Tiempos de espera para diferentes valores del campo aplicado, con $\theta_B = 0^\circ$.

Para campos en los rangos de $0,25 \leq B_a \leq 2,4$ kOe, encontramos que la propagación ocurre siempre a una velocidad constante, lo que es característico de un régimen viscoso. [69] En este caso, la respuesta de la pared a campos débiles puede ser descrita por la ecuación clásica de movimiento para un oscilador sobre amortiguado [64], dando origen a la siguiente expresión para la velocidad de la pared en un estado estacionario: v :

$$v = S(B_a - B_0) , \quad (4.3)$$

en donde S es la movilidad y B_0 es un parámetro que usualmente es obtenido mediante ajuste de los datos. Este parámetro es medido con un campo aplicado más alto que un cierto valor de depinning, extrapolado el punto $v = 0$ [63, 64]. Podemos revisar la validez de (4.3) calculando la velocidad de la pared para diferentes valores del campo aplicado. Los resultados se

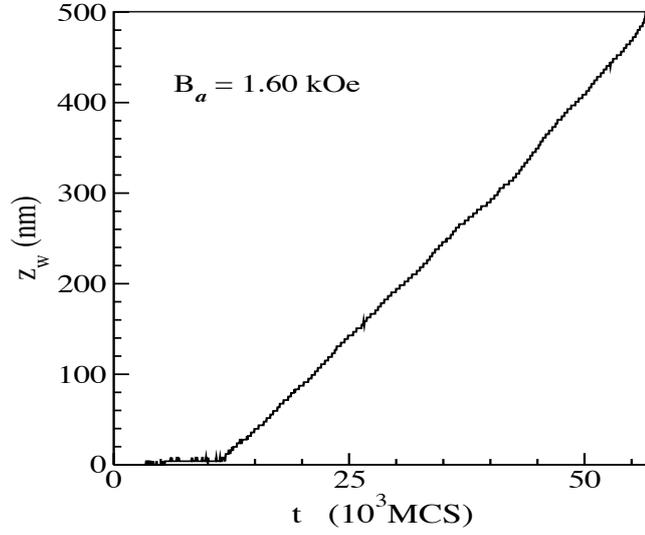


Figura 4.5: Posición de la pared en función del tiempo.

presentan en la figura 4.6 junto con los valores de la tasa de la disipación de energía debida al proceso de relajación. En esta figura se pueden apreciar tres regímenes:

1. $0,25 \text{ kOe} \lesssim B_a \lesssim 1,3 \text{ kOe}$ – Se observa un régimen lineal. En este intervalo de campo se necesita un pulso para poder nuclear una pared de dominio. Luego de la aplicación del pulso, la pared se mueve con velocidad constante;
2. $1,3 \text{ kOe} \lesssim B_a \lesssim 1,7 \text{ kOe}$ – Se observa un régimen lineal. La pared de dominio nuclea espontáneamente, sin necesidad de aplicar un pulso, y se propaga con una velocidad constante. La movilidad S es la misma que en el régimen anterior;
3. $1,7 \text{ kOe} \lesssim B_a \lesssim 2,4 \text{ kOe}$ – Se observa un régimen no lineal. Los valores de velocidad son mayores que los valores que se obtienen extrapolando los datos obtenidos en las regiones anteriores. Otro aspecto importante

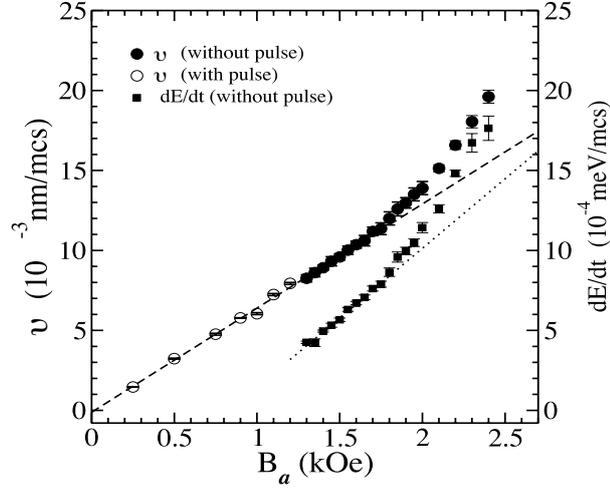


Figura 4.6: Taza de disipación de energía (eje derecho, cuadrados) y velocidad de la pared (eje izquierdo, círculos) como función del campo aplicado. Los símbolos abiertos corresponden a una propagación detonada por un pulso de campo.

es que para estos valores de campo, la pared de dominio pierde su rigidez(forma) a medida que se propaga por el hilo;

Con el fin de poder comprender lo que sucede en la región no lineal, comparamos los perfiles de la magnetización para distintos valores de B_a . La figura 4.7 muestra instantáneas de las paredes de dominio a diferentes posiciones a lo largo del hilo. Esas fotos están para $B_a = 1,3$ kOe, 2,4 kOe y 3,0 kOe. Para $B_a = 1,3$ kOe (Fig. 4.7(a)), se observa que la propagación está al inicio del segundo régimen lineal. Las regiones delante y detrás de la pared poseen una magnetización saturada y uniforme, en donde la pared está bien definida, presentando un ancho de $\delta = 40$ nm. El mismo comportamiento se observa para todos los valores de campo dentro de la segunda región lineal.

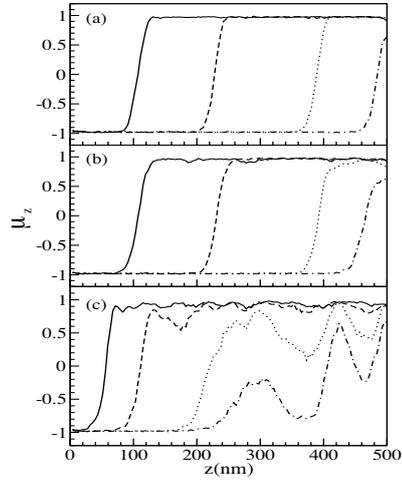


Figura 4.7: Perfil de la magnetización para (a) $B_a = 1,3$ kOe, (b) $B_a = 2,4$ kOe y (c) $B_a = 3,0$ kOe. Los distintos estilos de líneas muestran las diferentes etapas de la propagación de la pared de dominio a lo largo del hilo. Los tiempos de reversión en (a), (b) y (c) son tiempos independientes entre si. Para campos $B_a \gtrsim 2,4$ kOe, Se observa que las region que esta delante y próxima a la pared de dominio comienza a ser inestable y para $B_a \gtrsim 3,0$ kOe se observan dominios revertidos que han nucleado delante de la pared de dominio, es decir, múltiples paredes de dominio.

$B_a = 2,4$ kOe (Fig. 4.7(b)) está dentro de la región no lineal, mostrando fluctuaciones en los valores de la magnetización delante de la pared, la cual es más gruesa, con un ancho de $\delta \approx 55$ nm. Aún así es posible apreciar una pared de dominio, y asociarle un posición y velocidad definidas. Esto no ocurre cuando $B_a = 3,0$ kOe, campo para el cual el estado uniforme delante de la pared es inestable. Esto último trae como consecuencia la formación de varias paredes de dominio, como se aprecia en la figura 4.7(c).

4.3.2. Propagación con $\theta_B \neq 0^\circ$

Para entender mejor el proceso de reversión de la magnetización para campos con $\theta_B \neq 0^\circ$, dividimos el proceso de reversión en tres etapas. En la primera etapa, o etapa de redirección de los momentos magnéticos, los momentos magnéticos rotan hasta formar algún ángulo con el eje z . Este movimiento es inducido por un torque producido por las componentes xy del campo aplicado y por el bajo campo desmagnetizante que tiene el hilo en ese plano. La redirección de los momentos magnéticos trae como consecuencia la disminución de la anisotropía de forma a lo largo de eje del hilo. Esto ultimo hace mas fácil la nucleación y la formación de paredes de dominio. La segunda etapa, o etapa de nucleación, corresponde a la nucleación de la pared de dominio y depende fuertemente de la magnitud de la componente z del campo aplicado (dirección del eje del hilo), tal como en el caso de $\theta_B = 0^\circ$. La ultima etapa, la etapa de propagación, corresponde a la propagación de la pared de dominio ya formada. Definir el tiempo de reversión, t_r , como la suma de los tiempos que involucran las tres etapas mencionadas.

La figura 4.8 muestra la dependencia del promedio del tiempo de reversión con el ángulo θ_B para distintos valores del campo aplicado. Desde $\theta_B = 0$ a $\theta_B \sim 45^\circ$, t_r decrece de forma continua hasta alcanzar un mínimo o plateau, el cual corresponde a una combinación óptima de las etapas de redirección, nucleación y propagación. Para el caso de $B_a = 1,3$ kOe, se observa la formación y propagación de una sola pared de dominio para todos los valores de θ_B . Además, en este caso la pared de dominio se propaga con una velocidad bien definida que depende de θ_B como lo muestra la figura 4.9. Para $B_a = 1,4$ kOe, se nuclean varias paredes de dominio para los ángulos $20^\circ \lesssim \theta_B \lesssim 60^\circ$ disminuyendo de forma considerable el valor de t_r .

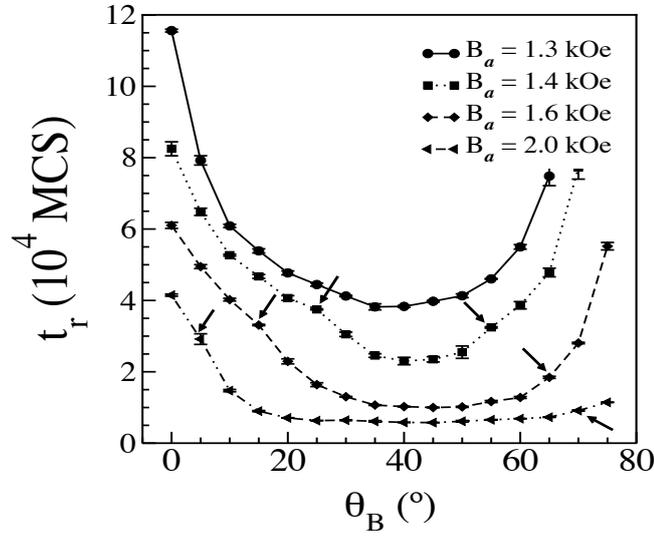


Figura 4.8: Tiempo de reversión magnética como función del ángulo del campo aplicado, θ_B , para diferentes valores de campo. Los valores de t_r representan promedios sobre seis realizaciones. Las flechas delimitan regiones en las cuales se forman múltiples paredes de dominio.

El mismo comportamiento se observa para campos mayores, para ángulos en los intervalos señalados con flechas en la figura 4.9, y podemos concluir que, a medida que el valor del campo aumenta, la región de nucleación de múltiples paredes aumenta también. Además, a lo largo de una línea $t_r(\theta_B)$ dada, para $B_a \geq 1,4$ kOe, se pueden apreciar cuatro regimenes distintos. Por ejemplo, al tomar la curva para $B_a = 1,6$ kOe, tenemos que para ángulos pequeños, $\theta_B \lesssim 5^\circ$, la propagación es mediante el modo de reversión corkscrew. A medida que la componente perpendicular del campo aumentan, es decir, para $5^\circ \lesssim \theta_B \lesssim 15^\circ$, el plano de reversión se fija, y la reversión de una sola pared es conducida mediante el modo transversal. Incrementos mayores de θ_B originan una tercera región, $15^\circ \lesssim \theta_B \lesssim 20^\circ$, en la cual la reversión es transversal pero ahora nuclea una segunda pared de dominio en el extremo opuesto a la primera nucleación. Para $20^\circ < \theta_B < 65^\circ$, la reversión de la

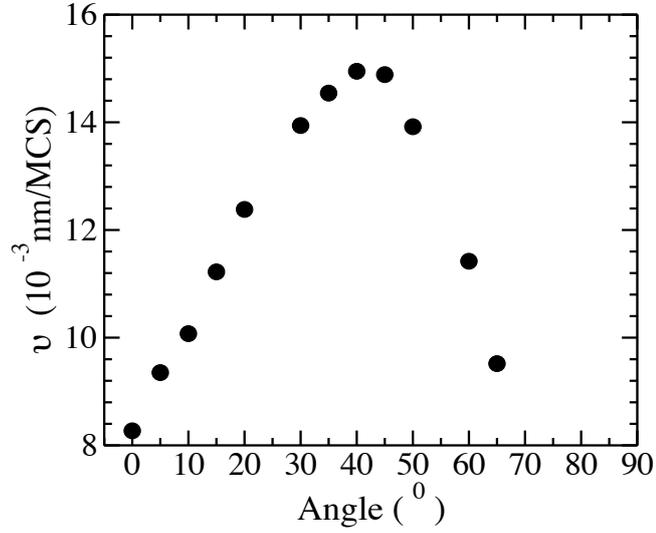


Figura 4.9: Velocidad de propagación de la pared como función de θ_B para $B_a = 1,3$ kOe.

magnetización ocurre mediante la formación de varias paredes de dominio en distintas partes del hilo. Un hecho importante, es que en la vecindad de $\theta_B \sim 45^{\circ}$, se observa que el proceso de reversión, luego de la activación de la reversión en el extremo más favorables del hilo, continua con un proceso prácticamente coherente a lo largo de todos los hilos (ver figura 4.3c). Por último para $\theta_B \gtrsim 45^{\circ}$, la disminución de la componente paralela del campo da origen a valores mayores de t_r debido a el significativo aumento en el tiempo de nucleación.

4.4. Conclusión

En este capítulo hemos estudiado la propagación de paredes de dominio en un nanohilo homogéneo de níquel utilizando simulaciones Monte Carlo

y la técnica de escalamiento. Con este acercamiento hemos podido calcular sistemáticamente la velocidad de la pared de dominio. Como resultado de este análisis encontramos cuatro regímenes para la propagación de la pared, según sea la magnitud del campo aplicado y la dirección de este. Cuando el campo se aplica en una dirección paralela al eje del hilo encontramos que, para campos bajos e intermedios, la nucleación de la pared requiere una cantidad de tiempo que crece rápidamente a medida que decrece la magnitud del campo aplicado. Este aumento del tiempo no es efecto del desorden, pues el hilo se ha construido como un cristal perfecto. Aparece únicamente debido a la existencia de una barrera de energía dependiente del campo, entre estados con magnetización positiva y negativa. Para campos de 0.25 kOe a 1.7 kOe, la propagación de la pared depende linealmente del campo, de acuerdo al cuadro clásico de relajación viscosa [63], y se mantiene constante a lo largo del hilo. También se puede apreciar que el ancho de la pared es aproximadamente de 40 nm. Para campos mayores, de hasta 2.4 kOe, la velocidad entra en un régimen no lineal, mostrando valores mayores que los calculados mediante la extrapolación de los datos obtenidos para el régimen lineal. En esta región, el ancho de la pared de dominio aumenta continuamente hasta $\delta = 55$ nm para $B_a = 2,4$ kOe. Los resultados de la figura 4.6 pueden formar parte de la relación de relajación (4.3) si redefinimos la movilidad, haciéndola ahora dependiente del campo. En el contexto de la propagación de una pared unidimensional en un medio cristalino ferromagnético, un modelo simple que toma en cuenta solamente las energías de intercambio y la anisotropía cristalina [62], predice una movilidad de la pared de la forma:

$$S \propto \delta , \quad (4.4)$$

debido a que la movilidad de la pared de dominio es $S = 2M_s/\beta$, donde M_s es la magnetización de saturación y β es el amortiguamiento de la pared

de dominio, dado sólo por la contribución del amortiguamiento dependiente del spin, el cual es proporcional a M_s/δ . El ancho de la pared puede ser calculado minimizando la energía [70] dando origen a una forma general $\delta \propto \sqrt{J/K}$. La constante K es una constante de anisotropía uniaxial que usualmente se asume de origen cristalino. En este modelo, dado un cierto material, una vez M_s , K y J están fijos, o al menos sus promedios, la velocidad de la pared queda determinada, independiente del campo aplicado. Nuestras simulaciones, muestran que, para campos suficientemente grandes ($> 1,7$ kOe), la velocidad medida es mayor que la predicha por la relación lineal ya antes mencionada. Por consiguiente, el valor de δ en este rango de campos, medido directamente de los perfiles de la magnetización, aumenta. Interpretamos este último resultado definiendo una constante de anisotropía dependiente del campo, $K(B)$. Nuestras simulaciones no incluyen una anisotropía cristalina, por lo que la única fuente de ella es la anisotropía de forma o la presencia de un campo desmagnetizante. Este campo desmagnetizante es afectado por las fluctuaciones alrededor del estado uniforme de la magnetización, haciendo que este decrezca. Para $B_a > 2,4$ kOe, este efecto puede destruir la estabilidad del dominio delante de la pared, produciendo varias paredes de dominio. Comprobamos esta hipótesis introduciendo una anisotropía uniaxial arbitraria a lo largo de la dirección de propagación. Nuestros resultados mostraron que la velocidad de propagación decrece linealmente con la constante de anisotropía. Para el campo de 2.4 kOe, la constante de anisotropía necesaria para la propagación con la velocidad predicha por el régimen viscoso fue $5,3 \times 10^6 \text{erg/cm}^3$, esto último es mucho más grande que los valores usuales atribuidos a níquel.

El comportamiento del tiempo de reversión a medida que variamos θ_B , (ver figura 4.8), puede ser comparado con el obtenido en un experimento realizado por Wernsdorfer *et al.* para campos de nucleación. El experimento

fue realizado en un nanohilo de níquel con diámetro $d = 50$ nm. [59]. El incremento del campo de nucleación para $\theta_B = 0^\circ$ y $\theta_B = 90^\circ$ predicho por el modelo de rotación coherente es consistente con el incremento del tiempo de reversión en nuestras simulaciones.

Capítulo 5

Reversión magnética en nanotubos.

5.1. Introducción

En los dos últimos capítulos hemos presentado nuestros resultados para nanohilos magnéticos de Ni. En ambos se observa que la reversión magnética ocurre mediante la nucleación de una pared de dominio transversal, que es el modo de reversión característico en nanohilos de diámetro 30 nm [41]. En este capítulo, y utilizando la misma metodología, presentamos un estudio similar para la reversión de la magnetización en nanotubos. Los nanotubos magnéticos, de reciente fabricación [71, 72, 73, 74], han concentrado una gran atención en los últimos años debido a sus potenciales aplicaciones. Su baja densidad les permite flotar en soluciones, haciéndolos adecuados para aplicaciones en biotecnología [71]. Asimismo presentan una configuración magnética libre de core, lo que favorece campos de nucleación uniformes (switching field), garantizando su reproducibilidad [74, 75]. También ofrecen, a diferencia de los nanohilos, dos superficies para modificar, la interna y la externa, permitiendo

un mejor manejo de su geometría para hacerlos adecuados para aplicaciones particulares.

Resultados experimentales [73], simulaciones numéricas [74] y cálculos analíticos [75] han identificado principalmente dos estados fundamentales en estos tubos: Un ordenamiento magnético en el plano, llamado vórtice y un estado uniforme con todos los momentos magnéticos paralelos apuntando en la dirección del eje del tubo. Si bien los procesos de reversión son bien conocidos en nanohilos magnéticos [61,62,76,77,78], por ser la síntesis de nanotubos magnéticos reciente, no existe un gran número de estudios respecto de estos procesos. A continuación estudiaremos el proceso de reversión de la magnetización en nanotubos de níquel en función de su geometría. Nuestros resultados están de acuerdo con resultados analíticos presentados por Landeros et al [6].

5.2. Modelo

Nuestro sistema a estudiar es un nanotubo ferromagnético en un estado con magnetización \vec{M} a lo largo del eje. Aplicamos un campo magnético constante y uniforme antiparalelo a \vec{M} . Después de un tiempo de espera, la reversión magnética se iniciará en los extremos del tubo. Geométricamente, los tubos están caracterizado por los radios externo R e interno a y largo L . Es conveniente definir la razón $\beta \equiv a/R$, de tal forma que $\beta = 0$ representa un hilo y $\beta \rightarrow 1$ corresponde a un tubo muy delgado, ver figura 5.1.

La energía interna de un nanotubo, E , con N momentos magnéticos puede ser escrita como:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N (E_{ij} - J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) + E_a,$$

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

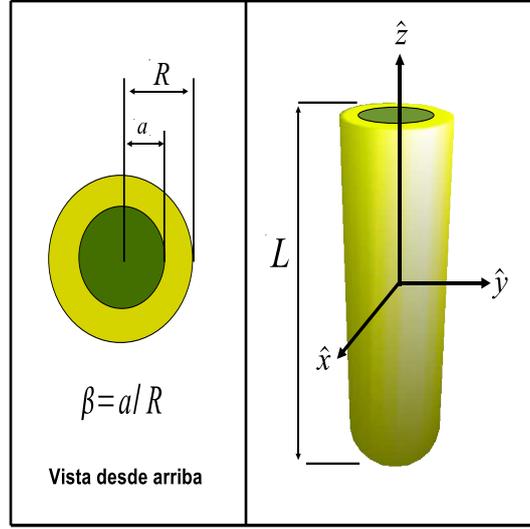


Figura 5.1: Parámetros geométricos de un nanotubo magnético.

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

con r_{ij} la distancia entre los momentos magnéticos \vec{m}_i y \vec{m}_j y \hat{n}_{ij} es el vector unitario a lo largo de la dirección que conecta \vec{m}_i y \vec{m}_j . $J_{ij} = J$ es la constante de intercambio entre primeros vecinos y $J_{ij} = 0$ en otro caso. $E_a = -\sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_a$ es la contribución del campo magnético externo. En este capítulo estamos interesados en materiales magnéticos blandos, es decir, la interacción anisotrópica será ignorada [71, 74]. En nuestras simulaciones consideramos tubos de níquel con $|\vec{m}_i| = 0,61 \mu_B$, parámetro de red $a_0 = 3,52 \text{ \AA}$ y $J = 1600 \text{ kOe}/\mu_B$ [45]. Las dimensiones de los tubos a investigar son $R = 15 \text{ nm}$, Largo $L = 0,5 \mu\text{m}$ y variaremos el radio interno a . Además asumimos un crecimiento a lo largo de la dirección cristalográfica [100] de una red fcc. Los tubos que investigamos presentan a lo menos 10^8 átomos, por lo que hacemos uso de la técnica de escalamiento para reducir el número de átomos en el nanotubo. Utilizando $\chi \sim 10^{-3}$ y $\eta = 0,56$, nuestro hilo

tendrá del orden de 10^3 momentos magnéticos localizados. Al igual que en los capítulos anteriores, utilizaremos simulaciones Monte Carlo con el algoritmo de Metrópolis con una dinámica local y el método single-spin flip [49]. Nuestros cálculos son a una temperatura $T = 300$ K, la cual se ha escalado de la forma $T' = \chi^{3\eta}T$ como se ha explicado previamente, ver capítulo 2.

5.3. Resultados y discusión

En nuestras simulaciones numéricas variamos el radio interno del tubo, lo que es equivalente a variar β , parámetro que tomó valores entre 0,17 y 0,83. La magnetización inicial del nanotubo está saturada a lo largo del eje del cilindro, eje \hat{z} , con el campo externo \vec{B}_a aplicado en la dirección $-\hat{z}$. Como la nucleación de las paredes de dominio se realiza en ambos extremos del tubo, para tener sólo una pared, el campo magnético externo no ha sido aplicado en los últimos 12 nm del nanotubo, siguiendo un procedimiento de “pinning” usado en experimentos con nanohilos [62]. Para cada valor de β consideramos campos externos de $|\vec{B}_a| = 1,3$ kOe, 1,5 kOe y 1,7 kOe, y realizamos entre diez y quince simulaciones con semillas diferentes para cada conjunto de valores de \vec{B}_a y β . En general no observamos diferencias en nuestros resultados en relación al modo de reversión al variar el campo, siendo la excepción el que en tubos muy delgados, con $\beta = 0,83$, y un campo de 1.7 kOe se observa primero una reversión de tipo vórtice, pero después aparecen multidominios. Esto se debe a que el campo es suficientemente intenso como para nuclear diversas paredes a lo largo del nanotubo, tal como se muestra en el capítulo anterior para nanohilos. La tabla siguiente resume nuestros resultados en aquellos casos en donde se observa la propagación de una sola pared de dominio.

La tabla 5.1 muestra los modos observados en nuestras simulaciones para

β	0,17	0,33	0,5	0,67	0,83
<i>Modo</i>	<i>T</i>	<i>T(V)</i>	<i>V</i>	<i>V</i>	<i>V</i>

Cuadro 5.1: Resultados de las simulaciones para diferentes valores de β . *T* representa un modo de reversión con una pared de dominio transversal, y *V* denota la nucleación de una pared de dominio del tipo vórtice.

diferentes valores de β . Mientras el modo que presenta una pared transversal, *T*, aparece para $\beta \leq 0,33$, una pared de dominio del tipo vórtice, *V*, aparece siempre para $\beta \geq 0,5$. Para $\beta = 0,33$ hay tres semillas, de un total de 15 utilizadas, que muestran un comportamiento mixto: El proceso de reversión comienza con el modo *T* cambiando al modo *V* durante la propagación de la pared. La nucleación y propagación de la pared es monitoreada por el valor de $\bar{m}_i(z) \equiv \bar{M}_i(z)/M_0$ que son los valores promedio de las componentes $i = x, y, z$ de los momentos magnéticos a una determinada posición z del nanotubo, relativa al valor de saturación. La posición de la pared queda determinada por el máximo de $(1 - |\bar{m}_z|)$ y se muestra en la figura 5.2.

Cuando m_x y m_y promedian cero simultáneamente, el mecanismo de reversión es la propagación de una pared de vórtice, *V*. Cuando una o dos de las componentes en el plano es o son distintas de cero, entonces la reversión ocurre por la propagación de una pared transversal, *T*. La figura 5.2(a) muestra claramente un modo de reversión con una pared transversal(*T*). De las dos instantáneas para este tubo se puede concluir que, a medida que se propaga a lo largo del tubo, la pared varía el ángulo que forma en el plano $x - y$. La figura 5.2(b) muestra en la etapa t_1 , una pared de dominio transversal (*T*), mientras que en la etapa, t_2 se muestra una pared de tipo vórtice, *V*. En la figura 5.2(c), se ilustra la reversión mediante la propagación de una pared de tipo vórtice, *V*, a lo largo de todo el tubo.

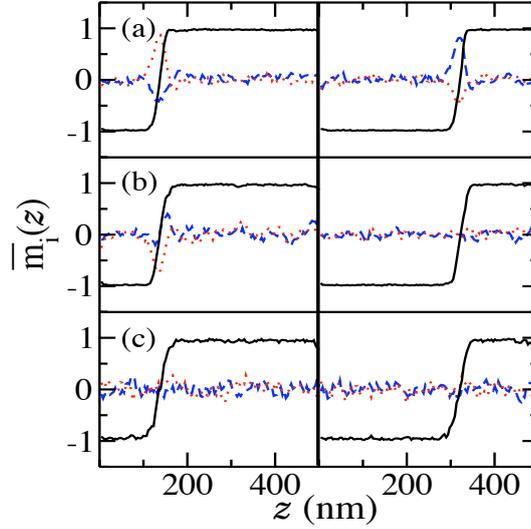


Figura 5.2: Instantáneas de la reversión magnética de tubos definidos por $\beta = 0,17$ (a), $0,33$ (b) y $0,5$ (c) en dos etapas diferentes del proceso de reversión. En ellas se muestran los promedios de las componentes de la magnetización en la posición z del tubo. \bar{m}_x : línea de puntos azul, \bar{m}_y : línea de trazos roja y \bar{m}_z : línea sólida negra.

Recientemente, Landeros et al [6] mostraron, mediante cálculos analíticos, que para cada β existe un radio crítico, $R_c(\beta)$, para el cual las barreras de energía para los modos V y T son iguales. Para radios tales que $R < R_c(\beta)$, la reversión de la magnetización ocurre por la propagación de una pared del tipo transversal, mientras que para $R > R_c(\beta)$ la magnetización revierte nucleando una pared de dominio del tipo vórtice. La figura 5.3 muestra el gráfico de R_c en función de β obtenido por Landeros et al. para tubos de níquel. Se puede observar de esta figura 5.3 que para $\beta < 0,33$ se presenta una reversión tipo transversal, lo cual coincide con nuestras simulaciones. Para $\beta = 0,33$, se observa que el radio crítico es aproximadamente 15 nm (marcado con un punto en la figura). Nuestras simulaciones para esta geo-

metría muestran que hay un comportamiento mixto entre ambos modos de reversión, en acuerdo a lo que muestran los cálculos analíticos. Por ultimo para $\beta > 0,33$ el modo de reversión debe de ser del tipo vórtice si el radio del tubo es 15 nm, coincidente nuevamente con nuestras simulaciones.

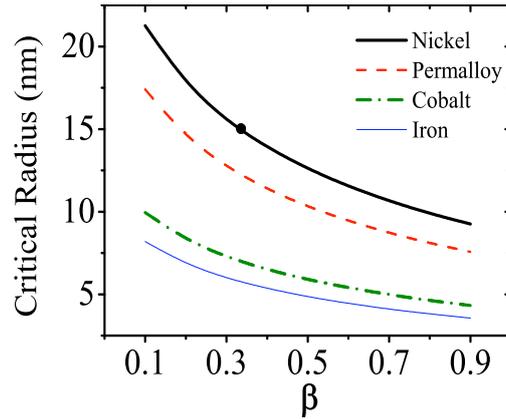


Figura 5.3: Radio crítico como función de β para diferentes nanotubos magnéticos [6].

5.4. Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado la propagación de paredes de dominio en un nanotubo homogéneo de níquel utilizando simulaciones Monte Carlo y la técnica de escalamiento. En nuestros resultados se pudo observar de que existen dos tipos de paredes de dominio en el procesos de reversión de la magnetización, los cuales dominan según la geometría del tubo. Uno de estos mecanismos es la propagación de una pared de dominio transversal, el cual se presenta en tubos con $\beta < 0,33$ y $R = 15$ nm. El otro mecanismo es la propagación de una pared de dominio de tipo vórtice. Este tipo de reversión ocurre en tubos con $\beta > 0,33$ y $R = 15$ nm. Estos resultados están

en buen acuerdo con los obtenidos analíticamente por Landeros et al [6]. Finalmente, nuestras simulaciones numérica muestran que para $\beta = 0,33$ y $R = 15$ nm pueden coexistir ambos modos. Es decir, la reversión de la magnetización se inicia con la nucleación de una pared de tipo transversal para luego, durante la propagación, cambiar de forma y generar una pared del tipo vórtice. Este resultado coincide con el obtenido analíticamente por Landeros et al [6], quienes muestran que para esa geometría las barreras de energía para nuclear cualquiera de ambas paredes son iguales.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado las propiedades magnéticas de nanohilos y nanotubos magnéticos homogéneos de níquel utilizando simulaciones Monte Carlo junto con la técnica de escalamiento. Se pudo investigar principalmente la coercividad y la reversión de un arreglo hexagonal de nanohilos mediante una celda de siete hilos magnéticos, centrándose el estudio en el hilo central. Las simulaciones mostraron una disminución de la coercividad y remanencia cuando la interacción de los hilos era altamente interactuante. La inclinación de la curva de histéresis que se observó cuando están los hilos muy interactuantes es atribuido solamente a la interacción dipolar que hay entre ellos. Estos resultados concuerdan con los resultados obtenidos de forma experimental. También se observó un máximo en la curva de coercividad en función de la separación de los hilos que viene dada por un orden particular de la reversión de los hilos que está determinada por la interacción dipolar entre ellos. Además observamos que la reversión magnética de un nanohilo magnético no interactuante, que comienza a revertir desde sus extremos, puede cambiar al estar interactuando con otros nanohilos.

También se pudo estudiar la propagación de las paredes de dominio

magnético en un nanohilo homogéneo de níquel. Se pudo estudiar el tiempo de nucleación de la pared de dominio en función de la magnitud del campo aplicado de forma antiparalela a la magnetización y se pudo observar que la nucleación de la pared requiere una cantidad de tiempo para nuclear que crece rápidamente a medida que decrece la magnitud del campo aplicado. Además se pudo estudiar la velocidad de la pared de dominio en función de la magnitud y dirección del campo magnético externo aplicado. Se obtuvo que si se aplica el campo de forma antiparalela a la magnetización, la reversión de la magnetización es mediante una pared de dominio transversal que se mueve con velocidad constante. Esta velocidad crece linealmente con los campos que van entre 0,25 kOe y 1,70 kOe. Este comportamiento lineal se pierde para campos superiores hasta 2,40 kOe, en donde la pared de dominio va aumentando su ancho y a su vez va perdiendo su rigidez, haciéndose más inestable las regiones próximas a la pared. Para campos mayores de 2,40 kOe se observa que la reversión no es solo de una sola pared de dominio si no de varias paredes, es decir, aparecen multidominios magnéticos. Con respecto a la propagación de una pared de dominio en función del ángulo del campo magnético externo respecto del eje del hilo, se observó que para un ángulo cercano a 45° , la velocidad de reversión de la magnetización es mayor que si el ángulo es cercano a 0° o 90° . Este aumento en la velocidad está definido por la existencia de una combinación óptima entre las tres etapas que conforman la reversión magnética: Etapa de redireccionamiento (etapa en la que los momentos magnéticos se orientan en una dirección definida por el eje del hilo y la dirección del campo magnético, etapa de nucleación (etapa en la cual se forma la pared de dominio) y la etapa de propagación (etapa en la cual la pared de dominio se propaga a lo largo del hilo).

Finalmente estudiamos la reversión en nanotubos magnéticos como función de la geometría, encontrando que existen fundamentalmente dos tipos

de reversión, mediante la propagación de paredes de dominio transversal o tipo vórtices. Estos mecanismos se manifiestan en función del radio interno y externo del nanotubo y parámetros que definen el material. Además, las simulaciones numérica muestran que para un nanotubo de níquel con un $\beta = 0,33$ y $R = 15$ nm pueden coexistir ambos modos. Es decir, la reversión de la magnetización se inicia con la nucleación de una pared de tipo transversal para luego, durante la propagación, cambiar de forma y generar una pared del tipo vórtice.

Bibliografía

- [1] J. N. Chapman, P. R. Aitchison, K. J. Kirk, S. McVitie, J. Kools, M. F. Gillies, *J. Appl. Phys.* **83**, 5321 (1998).
- [2] C. A. Ross, H. I. Smith, T. Savas, M. Schattenburg, M. Farhoud, M. Hwang, M. Walsh, M. C. Abraham, R. J. Ram, *J. Vac. Sci. Technol. B.* **17**, 3168 (1999).
- [3] P. Vargas, D. Altbir, J. d'Albuquerque e Castro, *Phys. Rev. B.* **73**, 092417 (2006).
- [4] M. Bahiana, F. S. Amaral, S. Allende, D. Altbir, *Phys. Rev. B.* **74**, 174412 (2006).
- [5] S. Allende, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana, J. P. Sinnecker, *J. Appl. Phys.* **104**, 013907 (2008).
- [6] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir, E. E. Vogel, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 102501 (2007).
- [7] Michael Fowler, historical beginnings of theories of electricity and magnetism, Virginia University, Phys.
- [8] Stephen Blundell, Magnetism in condensed matter, Oxford UP, Oxford University NY, 2001.

- [9] A. Butera, *Revista Ciencia Hoy*. **15**, abril-mayo (2005).
- [10] T. Ono, H. Miyajima, K. Shigeto, K. Mibu, N. Hosoi, and T. Shinjo, *Science*.**284**, 468 (1999).
- [11] R. D. McMichael y M. J. Donahue, *IEEE Trans. Magn.***33**, 4167 (1997).
- [12] Del Atkinson, Dan A. Allwood, Gang Xiong, Michael D. Cooke, Colm C. Faulkner, Russell P. Cowburn, *Nature Materials*.**2**, 85 (2003).
- [13] D. A. Allwood, Gang Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, D. Atkinson, N. Vernier, R. P. Cowburn, *Science*. **296**, 2003 (2002).
- [14] J.-O. Klein, E. Belhaire, C. Chappert, F. Ouchet, R. Cowburn, D. Read, D. Petit, *IEEE International Symposium on Circuits and Systems*, 2007. ISCAS 2007. 133 (2007).
- [15] D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. P. Cowburn, *Science*.**309**, 1688 (2005)
- [16] L. M. Socolovsky, M. Knobel y J. M. Vargas, *Revista Cubana de Física*.**20**, (2003).
- [17] J. Escrig, Tesis Doctoral , "Interacción dipolar entre sistemas micro y nanométricos". Universidad de Santiago de Chile. (2007).
- [18] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, S. F. Fischer, H. Kronmüller, T. Schweinböck, D. Weiss and U. Gösele, *J. Magn. Mater.* **249**, 234 (2002).
- [19] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, U. Gösele, S. F. Fischer and H. Kronmüller, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1360 (2001).

-
- [20] A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism. Clarendon Press, Oxford (1996).
- [21] R. C. O’Handley. Modern Magnetic Materials. John Wiley and Sons, New York (2000).
- [22] N. Spaldin. Magnetic Materials, Fundamentals and Device Applications. Cambridge University Press, New York (2003).
- [23] J. D. Jackson. Classical Electrodynamics. John Wiley and Sons. 2nd Edition, New York (1975).
- [24] W. F. Brown, Jr. Magnetoelastic Interactions. Springer-Verlag, Vol. 9, Berlin (1966).
- [25] P. Landero, Tesis Doctoral , ”Propiedades magnéticas de nanoestructuras con simetría cilíndrica”. Universidad de Santiago de Chile. (2007).
- [26] J. Palma, Tesis Ingeniería Física , ”Propiedades magnéticas de arreglos de nanohilos en membranas de alúmina porosa”. Universidad de Santiago de Chile. (2007).
- [27] J. d’Albuquerque e Castro, D. Altbir, J. C. Retamal, P. Vargas, Phys. Rev. Lett. **88**, 237202 (2002).
- [28] P. Landeros, J. Escrig, D. Altbir, D. Laroze, J. d’Albuquerque e Castro, P. Vargas , Phys. Rev. B **71**, 094435 (2005).
- [29] R. Hertel, J. Magn. Magn. Mater. **249**, 251 (2002).
- [30] H. Forster, T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess, V. Tsiantos, and J. Fidler, J. Magn. Magn. Mater. **249**, 181 (2002).
- [31] Hans-Benjamin Braun, Phys. Rev. Lett. **71**, 3557 (1993).

-
- [32] Hans-Benjamin Braun, *J. Appl. Phys.* **76**, 6310 (1994).
- [33] Hans-Benjamin Braun, *J. Appl. Phys.* **99**, 08F908 (2006).
- [34] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1082 (1953).
- [35] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer, New York (2002).
- [36] B. D. Cullity, *Introduction to magnetic materials*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1972.
- [37] L. C. Sampaio, E. H. C. P. Sinnecker, G. R. C. Cernicchiaro, M. Knobel, M. Vázquez, J. Velázquez, *Phys. Rev. B.* **61**, 8976 (2000).
- [38] M. Knobel, L. C. Sampaio, E. H. C. P. Sinnecker, P. Vargas, D. Altbir, *J. Magn. Magn. Mater.* **249**, 60 (2002).
- [39] J. Escrig, D. Altbir, M. Jaafar, D. Navas, A. Asenjo, M. Vázquez, *Phys. Rev. B* **75**, 184429 (2007).
- [40] R. Hertel, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 5752 (2001).
- [41] R. Hertel, J. Kirschner, *Physica B.* **343**, 206 (2004).
- [42] L. Clime, P. Ciureanu, A. Yelon, *J. Magn. Magn. Mater.* **297**, 60 (2006).
- [43] M. Vázquez, K. Pirota, J. Torrejón, D. Navas, M. Hernández-Vélez, *J. Magn. Magn. Mater.* **294**, 395 (2005).
- [44] D. J. Sellmyer, M. Zheng, R. Skomski, *J. Phys.: Condens. Matter.* **13**, R433 (2001).

-
- [45] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 2004.
- [46] U. Nowak, R. W. Chantrell, E. C. Kennedy, Phys. Rev. Lett. **84**, 163 (2000).
- [47] C. S. M. Bastos, M. Bahiana, W. C. Nunes, M. A. Novak, D. Altbir, P. Vargas, M. Knobel, Phys. Rev. B. **66**, 214407 (2002).
- [48] J. P. Pereira Nunes, M. Bahiana, C. S. M. Bastos, Phys. Rev. E. **69**, 056703 (2004).
- [49] K. Binder, D. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer, 2002.
- [50] M. Vázquez, M. Hernández-Vélez, K. Pirola, A. Asenjo, D. Navas, J. Velázquez, P. Vargas, C. Ramos, Eur. Phys. J. B. **40**, 489 (2004).
- [51] E. O. Samwel, P. R. Bissell, J. C. Loddre, J. Magn. Magn. Mater. **115**, 327(1992).
- [52] Y. Ishii, M. Sato, J. Magn. Magn. Mater. **82**, 309 (1989).
- [53] T. G. Sorop, C. Untiedt, F. Luis, M. Kroll, M. Rasa, L. J. de Jongh, Phys. Rev. B. **67**, 014402 (2003).
- [54] M. Hwang, M. Farhoud, Y. Hao, M. Walsh, C. A. Ross, T. A. Savas, H. I. Smith, IEEE Trans. Magn.. **36**, 3173 (2000).
- [55] M. Zheng, L. Menon, H. Zeng, Y. Liu, S. Bandyopadhyay, R. D. Kirby, D. J. Sellmyer, Phys. Rev. B. **62** 12282 (2000).
- [56] A. Aharoni and S. Shtrikman. Phys. Rev. **109**, 1522 (1958).

-
- [57] B. Barbara. *Solid State Sciences*. **7**, 668 (2004).
- [58] W. Wernsdorfer, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Barbara, B. Doudin, J. Meier, J.-Ph. Ansermet, and D. Maily. *Phys. Rev. B*. **55**,11552 (1997).
- [59] W. Wernsdorfer, B. Doudin, D. Maily, K. Hasselbach, A. Benoit, J. Meier, J. Ph. Ansermet, B. Barbara, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1873 (1996).
- [60] P. M. Paulus, F. Luis, M. Kröll, G. Schmid, and L. J. de Jongh. *J. Magn. Mater.* **224**, 180 (2001).
- [61] R. Wieser, U. Nowak, K. D. Usadel, *Phys. Rev. B*. **69**, 064401(2004).
- [62] R. Varga, K. L. Garcia, M. Vázquez, and P. Vojtanik. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 017201 (2005).
- [63] Albert-Laszlo Barabási and Harry Eugene Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press (2004).
- [64] G. Bertotti, *Hysteresis in magnetism. For Physicists, materials scientists, and engineers*. Academic Press, New York, NY (1998).
- [65] J. Mejía-López, D. Altbir, A. H. Romero, X. Batlle, Igor V. Roshchin, Chang-Peng Li, Ivan K. Schuller, *J. Appl. Phys.* **100**, 104319 (2006).
- [66] T. Reininger, H. Kronmuller, C. Gomezpolo, and M. Vazquez, *J. Appl. Phys.* **73**, 5357 (1993).
- [67] R. Novak. Master Thesis,UFRJ 2005.
- [68] Geoffrey S. D. Beach, Cornelius Nistor, Carl Knutson, Maxim Tsoi, James L. Erskine, *Nature*. **4**, 741 (2005).
- [69] R. Ferré, K. Ounadjela, J. M. George, L. Piraux, S. Dubois, *Phys. Rev. B*. **56**, 14066 (1997).

-
- [70] C. Kittel. *Rev. Mod. Phys.* **21**, 541 (1949).
- [71] K. Nielsch, F. J. Castaño, C. A. Ross and R. Krishnan, *J. Appl. Phys.* **98**, 034318 (2005).
- [72] Kornelius Nielsch, Fernando J. Castaño, Sven Matthias, Woo Lee, Caroline A. Ross, *Adv. Eng. Mat.* **7**, 217-221 (2005).
- [73] M. Daub, M. Knez, U. Gösele and K. Nielsch, submitted to *J. Appl. Phys.* (2006).
- [74] Z. K. Wang *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 137208 (2005).
- [75] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, E. E. Vogel, and P. Vargas, *J. Magn. Magn. Mater.* **308**, 233–237 (2007).
- [76] D. Hinzke, U. Nowak, *J. Magn. Magn. Mater.* **221** 365-372 (2000).
- [77] H. Forster, T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, V. Tsiantos, R. Dittrich, and J. Fidler, *J. Appl. Phys.* **91**, 6914 (2002).
- [78] K. Nielsch, R. Hertel, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, U. Gösele, S. F. Fischer and H. Kronmüller, *IEEE Trans. Magn.* **38**, 2571 (2002).