



Simulaciones micromagnéticas en nanohilos ferromagnéticos de Co-Ni con anisotropía transversal

Micromagnetic simulations in ferromagnetic Co-Ni nanowires with
transverse anisotropy

Nicolás Barrios Pizo

Anteproyecto de Grado

Director:
Dr. Luis Alfredo Rodríguez González

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Santiago de Cali, 2023

Aprobación del director:

Aprobación: _____

Dr. Luis Alfredo Rodríguez González

Universidad del Valle, Colombia

Departamento de Física

Índice

1. Introducción	1
2. Marco teórico	2
2.1. Ferromagnetismo	2
2.2. Términos de energía magnéticos	2
2.2.1. Energía de intercambio	2
2.2.2. Energía magnetostática	3
2.2.3. Energía de anisotropía magnetocristalina	3
2.3. Ecuaciones de Landau-Lifshitz y Gilbert	4
2.4. Simulaciones micromagnéticas	4
2.4.1. Métodos numéricos	4
2.4.2. Paquetes principales	4
2.5. Ciclos de histéresis	5
2.6. Nanohilos ferromagnéticos de Co-Ni con anisotropía transversal	6
3. Objetivos	7
3.1. Objetivo general	7
3.2. Objetivos específicos	7
4. Metodología	8
5. Cronograma de actividades	10
6. Recursos	11

Resumen

En este proyecto de investigación se propone realizar un estudio computacional del estado remanente y de los mecanismos de inversión de la imanación sobre nanohilos individuales de Co-Ni con anisotropía (ejes de fácil imanación transversal al eje del nanohilo). Para este fin, se realizan simulaciones micromagnéticas para estudiar la dependencia de la microestructura remanente en función de la geometría, la anisotropía magnetocristalina y la composición. Además de estudiar los procesos de inversión de imanación (ciclos de histéresis) para condiciones de interés. Uno de los estados más interesantes de este sistema son las cadenas de vórtices magnéticos generadas perpendicular al eje del nanohilo, estructuras magnéticas con potencial interés en aplicaciones de almacenamiento de información, desarrollado de memorias no volátiles, sensores, entre otros.

1. Introducción

El micromagnetismo, desarrollado entre 1930 y 1940, es una teoría continua que opera en la escala de 1 nm a varias micras. En dicha escala, la magnetización se puede considerar como una función continua de las coordenadas, y su magnitud se mantiene constante, en donde la dinámica de la magnetización se rige por las ecuaciones de Landau-Lifshitz y Gilbert (LLG). Dichas ecuaciones nos proporcionan un marco matemático para estudiar como evoluciona la magnetización en el tiempo, producto de diferentes procesos físicos tanto internos como externos al material. Entre estos procesos se encuentran las interacciones de intercambio, la interacción de un sistema de partículas con un campo magnético externo, la interacción entre dipolos magnéticos, etc [1, 2].

Sin embargo, obtener expresiones analíticas para las ecuaciones LLG, salvo algunas simplificaciones o aproximaciones, es en general una ardua tarea, por lo que las simulaciones micromagnéticas son una herramienta útil para estudiar los sistemas físicos en una escala manométrica. Estas simulaciones consisten, grosso modo, en la resolución numérica de las ecuaciones LLG. Su utilidad radica en que nos permite estudiar los procesos de magnetización de los materiales ferromagnéticos en gran detalle variando sus propiedades extrínsecas e intrínsecas, que experimentalmente sería muy complejo [3].

Entre la gran variedad de morfologías manométricas y subnanométricas que se pueden modelar, los nanohilos ferromagnéticos revisten de gran importancia por sus aplicaciones en el campo de almacenamiento de datos, tecnologías de sensores, aplicaciones en espintrónica (diodos tunelados y MRAM), medicina entre otros. Los nanohilos ferromagnéticos cilíndricos son sistemas físicos comúnmente con radios de entre 10 nm a 40 nm que, debido a su pequeño tamaño, presentan propiedades magnéticas exóticas. Estos nanohilos pueden ser obtenidos experimentalmente, por ejemplo, de la electrodeposición en plantillas. En este trabajo estudiaremos el estado remanente y los procesos de inversión de imanación del sistema de nanohilos basados en la aleación Co-Ni con anisotropía transversal al eje del nanohilo. Este sistema se caracteriza por una cadena de vórtices de flujo magnético equidistantes la cual puede ser controlada y modulada mediante propiedades intrínsecas y/o extrínsecas [4].

2. Marco teórico

2.1. Ferromagnetismo

El ferromagnetismo es un fenómeno físico, de tipo magnético, presente en ciertos materiales. Consiste en un comportamiento ordenado, en ciertas regiones (dominios magnéticos) del material, de sus momentos magnéticos (Figura 1). Este comportamiento se caracteriza por su magnetización espontánea, \mathbf{M} . Dicha magnetización depende fuertemente de la estructura cristalina del sólido, ya que los momentos dipolares magnéticos tienden a alinearse en los ejes “fáciles” [5]. En el micromagnetismo clásico, la magnitud de la magnetización, para una temperatura fija T , es constante, es decir, queda totalmente caracterizada por sus cosenos directores [2]

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, T) = \mu_0 \mathbf{J}_s = |M(T)|(\gamma_1(\mathbf{r})\hat{e}_1 + \gamma_2(\mathbf{r})\hat{e}_2 + \gamma_3(\mathbf{r})\hat{e}_3),$$

en donde γ_i son los cosenos directores referidos a algún sistema de referencia ortogonal con vectores unitarios \hat{e}_k ; \mathbf{J}_s es la polarización espontánea y μ_0 la permeabilidad magnética del vacío.

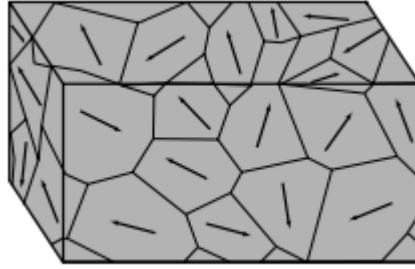


Figura 1: Dominios magnéticos en un sólido ferromagnético [5].

2.2. Términos de energía magnéticos

En el micromagnetismo, la relación básica para el estudio del fenómeno magnético es la densidad de energía libre de Gibbs, ϕ'_l , la cual se puede escribir como

$$\phi'_l = U - TS - \sigma \cdot \epsilon - \mathbf{J}_s \cdot \mathbf{H}_{ext},$$

en donde S es la densidad de entropía; U la densidad de energía interna; ϵ el tensor de estrés. Además, U contiene los términos de densidad de energía de intercambio, anisotropía magnetocristalina y magnetostática. Las variables libres son la temperatura T , el tensor elástico σ y el campo externo aplicado \mathbf{H}_{ext} [1, 2]. La energía libre de Gibbs total en equilibrio térmico está dada por

$$\phi_l = \int \phi'_l dV.$$

2.2.1. Energía de intercambio

El Hamiltoniano de intercambio de Heisenberg modela las interacciones de intercambio de los electrones desapareados, usualmente de los átomos vecinos más próximos [5], el cual podemos escribir de forma general como

$$\mathcal{H}_{ex} = -2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

en donde J_{ij} es la integral de intercambio y \mathbf{S}_k son los operadores de espín.

En el micromagnetismo, la derivación de una expresión continua para las interacciones de intercambio, entre los vecinos más próximos, parte del modelo de Heisenberg. En donde se considera a los operadores \mathbf{S}_k como vectores clásicos y el ángulo entre ellos cambia muy lentamente y de forma continua[2]. La densidad de energía de intercambio, ϕ'_{ex} , se puede escribir como

$$\phi'_{ex} = A \sum_{n=1}^3 (\nabla \gamma_n(\mathbf{r}))^2,$$

en donde A se le conoce como la constante de intercambio y depende en gran medida, entre otras cosas, de la estructura cristalina.

2.2.2. Energía magnetostática

La energía magnetostática consta de dos términos: la energía Zeeman y la energía dipolar.

Energía Zeeman

La energía Zeeman o también llamada energía magnetostática del campo externo, surge de la interacción de los momentos magnéticos electrónicos con el campo externo aplicado [2]. Se puede expresar la densidad de energía Zeeman como

$$\phi'_H = -\mu_0 \mathbf{H}_{ext} \cdot \mathbf{M}.$$

Energía Dipolar

En los sólidos cristalinos, cada momento dipolar produce un campo dipolar y cada uno de estos interaccionan con el campo producido por los demás dipolos magnéticos, \mathbf{H}_s . Como el campo magnético es generado sólo por los momentos dipolares se tiene $\nabla \times \mathbf{H}_s = 0$ y por tanto se le puede asociar un potencial escalar $\mathbf{H}_s = -\nabla U$ [1]. La energía dipolar toma la forma

$$\phi_s = \frac{1}{2} \mu_0 \oint_{S_0} \sigma(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) d\mathbf{S} + \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_0} \rho(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) dV,$$

donde $\sigma(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}}$ es la densidad superficial de carga magnética; $\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r})$ la densidad volumétrica de carga magnética y S_0 la superficie que contiene al volumen V_0 del sistema. Equivalentemente, se puede expresar la densidad de energía dipolar como

$$\phi'_s = \frac{\mu_0}{2} \mathbf{H}_s^2.$$

2.2.3. Energía de anisotropía magnetocristalina

La energía de anisotropía magnetocristalina está asociada con el hecho de que la magnetización en un dominio magnético, generalmente, tiende a orientarse a lo largo de ejes “fáciles” (Figura 2) [5]. Una expresión general para la densidad de energía, ϕ'_K , puede escribirse como [6]

$$\phi'_K = k_0(\mathbf{r}) + \sum_{i \neq j} k_{ij} \gamma_i(\mathbf{r}) \gamma_j(\mathbf{r}) + \sum_{ijk} k_{ijk} \gamma_i(\mathbf{r}) \gamma_j(\mathbf{r}) \gamma_k(\mathbf{r}) + \dots,$$

en donde los k son tensores de propiedades del material.

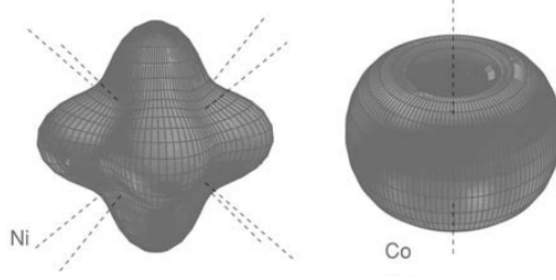


Figura 2: Superficies de energía de anisotropía magnetocristalina para el cobalto y el níquel. El cobalto tiene un eje “fácil” y el níquel cuatro [5].

2.3. Ecuaciones de Landau-Lifshitz y Gilbert

Las ecuaciones de Landau-Lifshitz y Gilbert (LLG) describen la evolución en el tiempo de la magnetización espontánea [2]

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma_G(\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}) - \frac{\alpha_G}{M}(\mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt}),$$

en donde γ_G es la relación giromagnética de los electrones; α_G la constante de amortiguamiento de Gilbert y $\mathbf{H}_{eff} = -(1/J_s)\partial\phi_l/\partial\mathbf{m}$ con $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$.

2.4. Simulaciones micromagnéticas

2.4.1. Métodos numéricos

Las ecuaciones LLG son un conjunto de ecuaciones no lineales acopladas por lo que obtener expresiones analíticas puede ser muy laborioso o incluso imposible. Así pues, se realizan aproximaciones numéricas para estudiar la dinámica de la magnetización. Los métodos más comunes son el micromagnetismo numérico de diferencias finitas (FE), basado en campo y el basado en energía, y el método de elemento finito (FD). El método FE basado en campo consiste en buscar la solución numérica sobre la base de una evaluación directa de las componentes del campo efectivo \mathbf{H}_{eff} bajo la restricción de las condiciones de frontera. El método FE basado en energía se da prioridad a la energía magnética y se calcula directamente de la magnetización discretizada, mientras que el campo efectivo se deriva de la energía resultante [7]. El método FD consiste en que el dominio se subdivide en elementos y se aproximan las cantidades de campo usando funciones nodales [8].

2.4.2. Paquetes principales

Existen una gran cantidad de paquetes de software de propósito general diseñados para resolver las ecuaciones LLG (Tabla 1). A grandes rasgos, las diferencias más importantes de estos paquetes son el método que usan para resolver las ecuaciones LLG, el hardware en el que corren (CPU o GPU) y si son de acceso gratuito o comercial[3]. En este trabajo de investigación nos centraremos en dos paquetes gratuitos muy populares: OOMMF y mumax³.

Nombre	FE/FD	CPU/GPU	Gratis?
LLG	FD	CPU	No
OOMF	FD	CPU	Si
micromagus	FD	CPU	No
magpar	FE	CPU	Si
Nmag	FE	CPU	Si
GPMagnet	FD	GPU	No
FEMME	FE	CPU	No
tetramaf ^b	FE	GPU	No
finmag ^c	FE	CPU	Si
Fastmag	FE	GPU	No
Mumax	FD	GPU	Si
micromagnum	FD	GPU	Si
magnum.fd ^d	FD	GPU	Si
magnum.fe	FE	CPU	No
mumax ³	FD	GPU	Si

Tabla 1: Lista de paquetes de software de propósito general [3].

2.5. Ciclos de histéresis

El fenómeno de histéresis consiste en la respuesta no lineal e irreversible de la magnetización con el campo aplicado, es decir, la magnetización espontánea no sigue una relación unívoca con el campo aplicado y depende, en gran medida, de las características intrínsecas e historia de preparación del material (Figura 3)[5, 9]. Además, en nanohilos magnéticos cilíndricos, este ciclo de histéresis también está influenciado por la orientación del campo magnético aplicado al mismo[10].

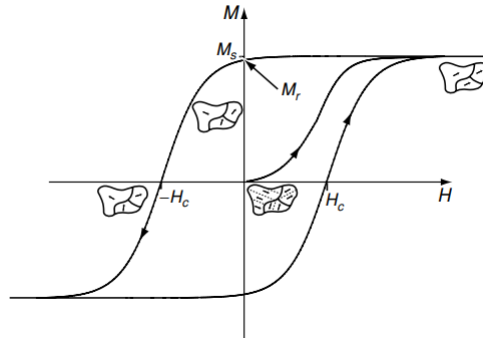


Figura 3: Ciclo de histéresis de un ferromagnético. En la imagen se ilustra el comportamiento de los dominios magnéticos cuando es magnetizado hasta la saturación M_s y cuando es aplicado un campo H_c (campo coersitivo) para la anulación de la imanación después de la saturación[5].

2.6. Nanohilos ferromagnéticos de Co-Ni con anisotropía transversal

Este sistema de nanohilos individuales se caracteriza por la aparición de una cadena de vórtices repartidos uniformemente a lo largo de la región *C2* (Figura 4). En dicha región, el flujo magnético rota alrededor de ejes fijos equidistantes. Además, la dirección de giro, horaria o antioraria, del flujo magnético cambia de forma alternada. En este sistema, conviven dos fases cristalográficas: hcp y fcc. En donde, se emplean una aleación de Co-Ni con poca concentración de Ni para orientar eje fácil uniaxial, propio de la estructura hcp, perpendicular al eje del nanohilo. De esta forma, vencer la anisotropía de forma que tiende a orientar la magnetización a lo largo del eje del nanohilo [4].

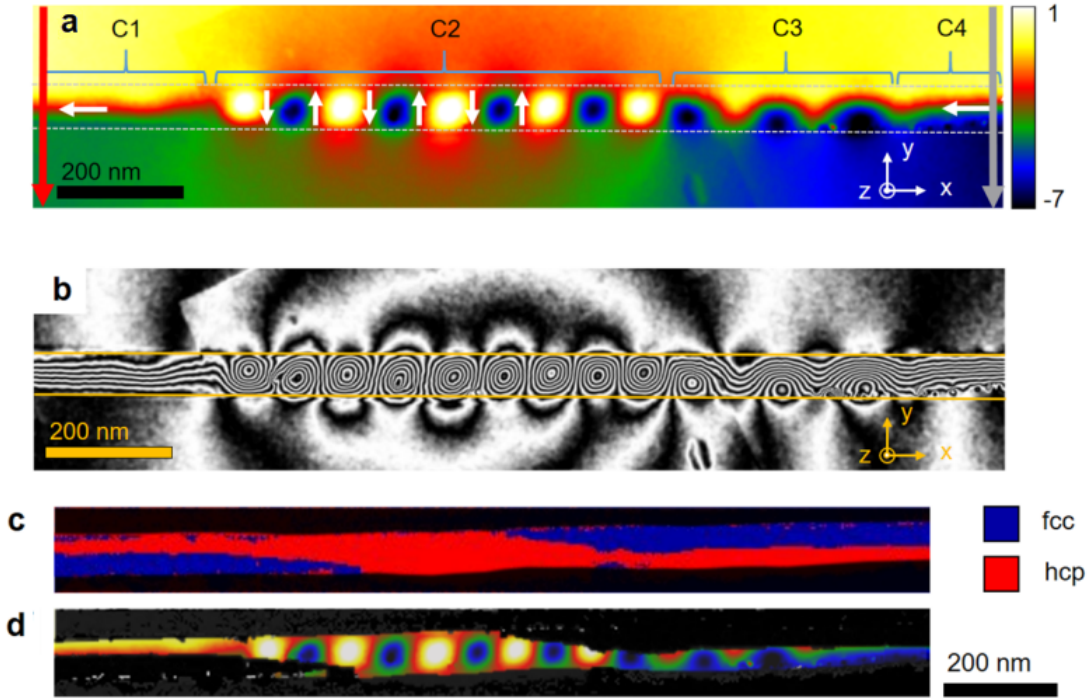


Figura 4: La figura a) muestra el cambio de fase magnética y b) muestra las líneas de flujo magnético. Las gráficas c) y d) corresponden a resultados experimentales del análisis estructural del nanohilo. La Figura c) muestra las fases cristalográficas fcc y hpc en la dirección *z* al eje del nanohilo. La figura d) muestra la superposición de las figuras a) y c) en donde solo la fase hcp es visible [4]

3. Objetivos

3.1. Objetivo general

Estudiar la microestructura magnética de nanohilos basados en la aleación Co-Ni y su dependencia con variables intrínsecas y extrínsecas.

3.2. Objetivos específicos

OE1: Estudiar la dependencia de la microestructura remanente como función de la geometría del nanohilo, la anisotropía magnetocristalina y la composición.

OE2: Estudiar el proceso de inversión de la imanación para condiciones y parámetros magnéticos de interés.

4. Metodología

Para dar cumplimiento con el **OE1**, se plantean realizar las siguientes actividades.

OE1. Actividad 1.1: Revisión bibliográfica del estudio de nanohilos de Co-Ni. Se llevará a cabo una revisión bibliográfica centrada en el sistema de nanohilos ferromagnéticos basados en la aleación Co-Ni [4, 10, 11]. Dicha revisión bibliográfica permitirá determinar la importancia de estudiar este tipo de sistema y conocer que otro tipo de estudio teórico, o de modelamiento, se han desarrollado en los nanohilos de Co-Ni. Además de esto, se revisarán aspectos relacionados con el fenómeno micromagnético y la microestructura de materiales ferromagnéticos [1, 2], las simulaciones micromagnéticas en nanohilos [7, 12] y aspectos generales del magnetismo [5, 9].

OE1. Actividad 1.2: Determinación de las condiciones apropiadas para el desarrollo de simulaciones micromagnéticas en nanohilos de Co-Ni. De acuerdo con la literatura consultada, se establecerán los parámetros micromagnéticos y rangos apropiados para el sistema de nanohilos con los que se llevarán a cabo las simulaciones. Entre los parámetros relevantes que se deben definir se encuentra la geometría y morfología de los nanohilos; la magnetización de saturación; la constante y tipo de anisotropía y; la constante de intercambio.

OE1. Actividad 1.3: Pruebas en el paquete de simulaciones seleccionado. Para el desarrollo de las simulaciones micromagnéticas, se evaluarán los posibles métodos o paquetes de simulación con los cuales se podría realizar el trabajo, dando especial importancia en aquellas que sean libres y que permitan simulaciones de la forma más eficiente. Entre los posibles paquetes se encuentra OOMMF, el programa de simulaciones más usado a nivel mundial; y mumax³, software que permite realizar simulaciones usando la GPU.

OE1. Actividad 1.4: Pruebas con los parámetros magnéticos seleccionados. Teniendo en cuenta los parámetros y rangos establecidos en la actividad 1.2, se realizarán un conjunto de simulaciones en las cuales se variarán los distintos parámetros de interés. En donde se buscará asegurar la validez y confiabilidad de los resultados mediante consideraciones físicas y lo reportado en la literatura.

OE1. Actividad 1.5: Simulaciones del estado remanente de los nanohilos de Co-Ni. Se realizará una serie de simulaciones del estado remanente de nanohilos de Co-Ni. Se realizará un análisis de los estados magnéticos remanentes observados en cada simulación, con el objetivo de identificar patrones y tendencias presentes en el sistema. Además, se buscará establecer correlaciones y proporcionar una explicación física para su causalidad.

Para dar cumplimiento con el **OE2**, se plantean realizar las siguientes actividades:

OE2. Actividad 2.1: Construcción del script para realizar simulaciones de ciclos de histéresis de los nanohilos de Co-Ni. Se desarrollará un script para el paquete de simulación seleccionado en donde se simularán los ciclos de histéresis para el sistema y determinar su comportamiento en diferentes configuraciones.

OE2. Actividad 2.2: Correlación de los estados magnéticos de los nanohilos de Co-Ni con la dirección de barrios de campo magnético. Se evaluarán los diferentes estados magnéticos que tome el nanohilo de Co-Ni en función con la orientación del campo magnético aplicado. El objetivo es comprender cómo la orientación del campo magnético afecta la microestructura magnética del nanohilo.

5. Cronograma de actividades

Actividades	Mes											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Actividad 1.1: Revisión bibliográfica del estudio de nanohilos de Co-Ni	⊗	⊗										
Actividad 1.2: Determinación de las condiciones apropiadas para el desarrollo de simulaciones micromagnéticas en nanohilos Co-Ni		⊗	⊗									
Actividad 1.3: Pruebas en el paquete de simulaciones seleccionado			⊗	⊗	⊗							
Actividad 1.4: Pruebas con los parámetros magnéticos seleccionados					⊗	⊗	⊗	⊗				
Actividad 1.5: Simulaciones del estado remanente de los nanohilos Co-Ni								⊗	⊗			
Actividad 2.1: Construcción del script para realizar simulaciones de ciclos de histéresis de los nanohilos de Co-Ni								⊗	⊗	⊗		
Actividad 2.2: Correlación de los estados magnéticos de los nanohilos de Co-Ni con la dirección del barrido de campo magnético									⊗	⊗	⊗	⊗

6. Recursos

El desarrollo de este trabajo de investigación, el cual tendrá una duración de 1 año (12 meses), requerirá de los siguientes recursos (en especie):

Luis Alfredo Rodríguez (dedicación 3 h/sem): \$10.600.000

Estación de cálculo (Workstation): \$4.000.000

Referencias

1. Kronmüller, H. y Fahnle, M. *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids* (Cambridge University Press, 2003).
2. Exl, L., Suess, D. y Schrefl, T. en *Handbook of Magnetism and Magnetic Materials* (eds. Coey, M. y Parkin, S.) 1-44 (Springer International Publishing, Cham, 2020).
3. Leliaert, J. y Mulkers, J. Tomorrow's micromagnetic simulations. *Journal of Applied Physics* **125** (2019).
4. Andersen, I. M. *et al.* Exotic Transverse-Vortex Magnetic Configurations in CoNi Nanowires. *ACS Nano* **14**, 1399-1405 (2020).
5. Coey, J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials* (Cambridge University Press, 2010).
6. Birss, R. *Symmetry and Magnetism* (North-Holland Publishing Company, 1964).
7. Miltat, J. E., Donahue, M. J. *et al.* Numerical micromagnetics: Finite difference methods. *Handbook of magnetism and advanced magnetic materials* **2**, 742-764 (2007).
8. Schrefl, T., Fidler, J., Chantrell, R. y Wongsam, M. Micromagnetics: Finite Element Approach. *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, 5651-5661 (2001).
9. Jackson, J. *Classical Electrodynamics* (Wiley, 2012).
10. Ivanov, Y. y Chubykalo-Fesenko, O. en *Magnetic Nano- and Microwires* (ed. Vázquez, M.) 423-448 (Woodhead Publishing, 2015).
11. Andersen, I. M. *et al.* Field tunable three-dimensional magnetic nanotextures in cobalt-nickel nanowires. *Phys. Rev. Res.* **3**, 033085 (2021).
12. Kumar, D. y Adeyeye, A. O. Techniques in micromagnetic simulation and analysis. *Journal of Physics D: Applied Physics* **50** (2017).
13. Moreno, J. A., Bran, C., Vazquez, M. y Kosel, J. Cylindrical Magnetic Nanowires Applications. *IEEE Transactions on Magnetics* **57**, 1-17 (2021).