



UNIVERSIDAD DE MEDELLÍN

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

**PROPAGACIÓN DE PAREDES DE DOMINIO EN DIFERENTES
NANO ESTRUCTURAS CUASI-UNIDIMENSIONALES**

Tesis para optar al grado de Doctor en Modelación y Computación
Científica

JHONATAN ALEXANDER MURILLO POLO

Directores de tesis:

Dr. Éver Alberto Velásquez Sierra

Dr. José Mejía López

Medellín, Colombia

2025

Esta tesis está dedicada a mi madre, Ana Victoria Polo; a mis hijos, Steven, Tania, Delú y Noah; a mi compañera de vida, Erica Mayorga; a mis hermanos, Efraín, Micaela, Ana Victoria, Isaac, Ana del Carmen, Yudys y Edison; y a mis sobrinos, Victoria, Alejandro, Angie y Carolina.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente, quiero expresar mi más sincero agradecimiento al doctor José Félix Mejía López y a su esposa, la profesora Karina Álvarez, por su apoyo incondicional y, sobre todo, por su paciencia (que sinceramente, hay que tenerla). Su disposición para ayudarme, incluso en los momentos más difíciles, ha sido invaluable. Han sido un pilar fundamental en mi formación, tanto académica como personal.

Del mismo modo, al doctor Ever Alberto Velásquez Sierra, quien también ha sido una figura clave en este camino. Su orientación, exigencia y confianza me impulsaron a dar lo mejor de mí cuando más lo necesitaba.

También quiero agradecer al doctor Johan Mazo Zuluaga por su tiempo, por las discusiones académicas y por los valiosos aportes que realizó a esta investigación en todo momento. Su disposición y compromiso marcaron una diferencia significativa en el desarrollo de este trabajo.

A mi madre, Ana Victoria Polo, que durante su paso por este mundo terrenal nunca dejó de creer en mí. Siempre me apoyó para ser una mejor persona y me enseñó a dar lo mejor de mí, no solo para crecer, sino también para ayudar a crecer a quienes me rodean. Su amor y ejemplo permanecen vivos en cada paso que doy.

A mis hijos Steven, Tania, Delú y Noah, quienes desde su llegada a mi vida se convirtieron en mi corazón latente en esta existencia. En especial a Steven y Tania, por su enorme paciencia y comprensión durante todo este proceso. Gracias por su amor incondicional y por ser una fuente constante de inspiración para seguir adelante, incluso en los momentos más difíciles.

Y a las madres de mis hijos: Erica Mayorga, Yessica Paniagua y Luisa Carmona, gracias por su presencia, apoyo y por ser parte esencial en el crecimiento de quienes más amo. Agradezco profundamente el rol que cada una ha desempeñado en este camino de vida y aprendizaje.

También quiero agradecer a mis compañeros, profesores y amigos que, desde el inicio de este camino, me brindaron su ayuda de una forma u otra en mi formación académica. A Hernán Salazar, por todo su apoyo y preocupación (casi paternal); a Camilo Balvin, por estar presente en momentos importantes. A Sergio Durango, Sandra Castaño y Miyela Arboleda, gracias por su amistad, su apoyo constante y sus consejos sinceros durante todos estos años.

Extiendo también mi agradecimiento a las instituciones que han sido parte

fundamental en mi proceso de formación. A la Institución Universitaria ITM, por haberme formado como profesional de pregrado y por el respaldo brindado como empleado. Y a la Universidad de Medellín, por haberme dado la oportunidad de iniciar mi carrera docente y por ser la institución donde culmino este doctorado. Gracias por abrirme las puertas y por confiar en mí.

A todos ustedes, les dedico con gratitud profunda este trabajo. Sin su guía, compañía y fe en mí, no estaría escribiendo estas líneas. Muchísimas gracias por todo.

RESUMEN

En esta tesis se estudia la propagación de paredes de dominio en nanoestructuras cuasi-unidimensionales, considerando nanoalambres ferromagnéticos de Fe con geometría cilíndrica. Los sistemas analizados corresponden a alambres con crecimiento a lo largo de la dirección cristalográfica [110], con momentos magnéticos dispuestos en una red bcc. Los diámetros de los nanoalambres varían entre 45 y 60 nm, y las longitudes entre 500 y 2500 nm, lo que implica sistemas discretos formados por millones de espines atómicos.

Para abordar el alto costo computacional de la dinámica de espines discreta en sistemas de este tamaño, se desarrolla e implementa una metodología innovadora que combina la Dinámica de Espines (SD) con la técnica de escalamiento energético y dimensional aplicada a modelos discretos de espines (ST), dando lugar al enfoque denominado “Dinámica de Espines Acelerada” (FASD). Este enfoque permite estudiar fenómenos magnéticos dependientes del tiempo en estructuras nanométricas, reduciendo el tamaño efectivo del sistema, preservando la competencia entre las interacciones magnéticas relevantes, manteniendo la descripción atomística del sistema y haciendo viable la simulación de nanoestructuras de tamaño real.

Este hallazgo es general y garantiza que las simulaciones realizadas con FASD son cuantitativas para cualquier nanoestructura discreta de espines, preservando la evolución temporal correcta del sistema.

La clave del enfoque FASD radica en la representación del tiempo dentro de la técnica de escalamiento. Se demuestra que el exponente de escala asociado al tiempo es igual a cero, lo que implica que el tiempo escalado coincide con el tiempo físico real. Este resultado es general y garantiza

que FASD permite realizar simulaciones cuantitativas de la dinámica de espines en nanoestructuras discretas, preservando correctamente la evolución temporal del sistema.

La validez del enfoque FASD se establece mediante comparaciones con simulaciones micromagnéticas del movimiento de paredes de dominio en nanoalambres cilíndricos, realizadas con el software mumax³. Se obtiene una coincidencia cuantitativa en magnitudes físicas clave, tales como la magnetización promedio, el perfil espacial de la pared de dominio y la velocidad de propagación, al tiempo que se reduce significativamente el costo computacional en comparación con simulaciones discretas directas del sistema real.

Finalmente, el enfoque FASD se aplica al estudio del movimiento de paredes de dominio en nanoalambres ferromagnéticos de diámetro modulado y en sistemas que contienen defectos. Se muestra que la modulación geométrica introduce retardos en la propagación de la pared de dominio, los cuales aumentan con la relación entre los diámetros grueso y delgado. En sistemas con defectos esféricos, se observa una disminución de la velocidad media de propagación al aumentar la concentración de vacancias, así como la aparición de múltiples nucleaciones para altas concentraciones de defectos. En el caso de defectos cilíndricos, la propagación resulta independiente de la longitud del defecto y dependiente de su diámetro, evidenciando la posibilidad de controlar la dinámica de las paredes de dominio mediante la ingeniería de defectos.

En conjunto, los resultados demuestran que FASD es una herramienta eficiente y cuantitativa para el estudio de la dinámica de paredes de dominio en nanoestructuras cuasi-unidimensionales, permitiendo abordar sistemas de tamaño y complejidad inaccesibles para los métodos tradicionales, y

proporcionando una descripción física detallada del rol de la geometría y los defectos en la dinámica de la magnetización.

En esta tesis se estudia la propagación de paredes de dominio en nanoestructuras cuasi-unidimensionales, considerando nanoalambres ferromagnéticos de Fe con geometría cilíndrica. Los sistemas analizados corresponden a alambres con crecimiento a lo largo de la dirección cristalográfica [110], con momentos magnéticos dispuestos en una red bcc. Los diámetros de los nanoalambres varían entre 45 y 60 nm, y las longitudes entre 500 y 2500 nm, lo que implica sistemas discretos formados por millones de espines atómicos.

Para abordar el alto costo computacional asociado a la dinámica de espines discreta en sistemas de este tamaño, se desarrolla e implementa una metodología innovadora que combina la dinámica de espines (SD) con la técnica de escalamiento energético y dimensional aplicada a modelos discretos de espines (ST), dando lugar al enfoque denominado Dinámica de Espines Acelerada (FASD). Este enfoque permite estudiar fenómenos magnéticos dependientes del tiempo en estructuras nanométricas, reduciendo el tamaño efectivo del sistema, preservando la competencia entre las interacciones magnéticas relevantes, manteniendo la descripción atomística y haciendo viable la simulación de nanoestructuras de tamaño real.

La clave del enfoque FASD radica en la representación del tiempo dentro de la técnica de escalamiento. Se demuestra que el exponente de escala asociado al tiempo es igual a cero, lo que implica que el tiempo escalado coincide con el tiempo físico real. Este resultado es general y establece que FASD preserva de manera cuantitativa la evolución temporal de la dinámica de espines en nanoestructuras.

La validez del enfoque FASD se establece mediante comparaciones

con simulaciones micromagnéticas del movimiento de paredes de dominio en nanoalambres cilíndricos, realizadas con el software mumax³. Se obtiene una coincidencia cuantitativa en magnitudes físicas clave, tales como la magnetización promedio, el perfil espacial de la pared de dominio y la velocidad de propagación, al tiempo que se reduce significativamente el costo computacional en comparación con simulaciones discretas directas del sistema real.

Finalmente, el enfoque FASD se aplica al estudio del movimiento de paredes de dominio en nanoalambres ferromagnéticos de diámetro modulado y en sistemas que contienen defectos. Se muestra que la modulación geométrica introduce retardos en la propagación de la pared de dominio, los cuales aumentan con la relación entre los diámetros grueso y delgado. En sistemas con defectos esféricos, se observa una disminución de la velocidad media de propagación al aumentar la concentración de vacancias, así como la aparición de múltiples nucleaciones para altas concentraciones de defectos. En el caso de defectos cilíndricos, la propagación resulta independiente de la longitud del defecto y dependiente de su diámetro, evidenciando la posibilidad de controlar la dinámica de las paredes de dominio mediante la ingeniería de defectos.

En conjunto, estos resultados demuestran que el enfoque FASD es una herramienta eficiente y cuantitativa para el estudio de fenómenos magnéticos en nanoestructuras, permitiendo abordar sistemas de tamaño y complejidad inaccesibles para los métodos tradicionales y ofreciendo una descripción física detallada del rol de la geometría y los defectos en la dinámica de las paredes de dominio, con aplicaciones potenciales en nanotecnología y dispositivos magnéticos.

ABSTRACT

In this thesis, the propagation of domain walls in quasi-one-dimensional nanostructures is investigated, considering ferromagnetic Fe nanowires with cylindrical geometry. The systems analyzed correspond to nanowires grown along the [110] crystallographic direction, with magnetic moments arranged on a bcc lattice. The nanowire diameters range from 45 to 60 nm, and their lengths from 500 to 2500 nm, which implies discrete systems composed of millions of atomic spins.

To address the high computational cost associated with discrete spin dynamics in systems of this size, an innovative methodology is developed and implemented by combining Spin Dynamics (SD) with an energy and dimensional scaling technique applied to discrete spin models (ST), giving rise to the approach termed Fast Spin Dynamics (FASD). This approach enables the study of time-dependent magnetic phenomena in nanometric structures by reducing the effective system size while preserving the competition among the relevant magnetic interactions, maintaining an atomistic description, and making simulations of realistically sized nanostructures computationally feasible.

The key feature of the FASD approach lies in the treatment of time within the scaling technique. It is demonstrated that the scaling exponent associated with time is equal to zero, implying that the scaled time coincides with the physical real time. This result is general and establishes that FASD quantitatively preserves the temporal evolution of spin dynamics in discrete nanostructures.

The validity of the FASD approach is established through comparisons with micromagnetic simulations of domain wall motion in cylindrical nanowires, performed using the mumax³ software. Quantitative agreement

is obtained for key physical quantities such as the average magnetization, the spatial profile of the domain wall, and the propagation velocity, while achieving a significant reduction in computational cost compared to direct discrete simulations of the real system.

Finally, the FASD approach is applied to the study of domain wall motion in ferromagnetic nanowires with modulated diameters and in systems containing defects. It is shown that geometric modulation introduces delays in domain wall propagation, which increase with the ratio between the thicker and thinner diameters. In systems with spherical defects, a decrease in the average propagation velocity is observed as the vacancy concentration increases, together with the emergence of multiple nucleation events at high defect concentrations. In the case of cylindrical defects, the propagation is found to be independent of the defect length but dependent on its diameter, demonstrating the possibility of controlling domain wall dynamics through defect engineering.

Overall, these results demonstrate that the FASD approach constitutes an efficient and quantitative tool for the study of magnetic phenomena in nanostructures, enabling the analysis of systems of size and complexity inaccessible to traditional methods and providing a detailed physical description of the role of geometry and defects in domain wall dynamics, with potential applications in nanotechnology and magnetic devices.

TABLA DE CONTENIDOS

1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	Propagación de paredes de dominio en nano estructuras	1
1.2	Desarrollo de la técnica de escalamiento en nanoestructuras	11
1.3	Breve historia del Micromagnetismo	14
1.4	Estructura de la tesis	19
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	21
2.1	Conceptos básicos del magnetismo	21
2.2	Interacciones magnéticas en materiales	26
2.3	Dinámica: Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert	35
2.4	Dominios Magnéticos y Paredes de Dominio	41
3	SIMULACIONES NUMÉRICAS	45
3.1	Dinámica de espines	45
3.2	La teoría del escalamiento	51
3.3	Teoría Micromagnética	57
3.4	mumax ³	62
4	DINAMICA DE ESPIN ACELERADA	66
4.1	Enfoque de la Dinámica de espín acelerada	66
4.2	Comparación entre FASD y cálculos micromagnéticos	75
4.3	Evaluación del enfoque FASD aplicado a la dinámica del estado S en Permalloy	80

TABLA DE CONTENIDOS

5 PAREDES DE DOMINIO EN DIFERENTES ESTRUCTURAS	87
5.1 Nanoalambres Modulados	87
5.2 Efecto de defectos esféricos en la propagación de la pared de dominio . .	95
5.3 Efecto de defectos cilíndricos extendidos en la propagación de la pared de dominio	104
6 CONCLUSIONES	112
REFERENCIAS	117
ANEXOS	132
A Complemento de los Algoritmos	132
A.1 Ejemplo del input.dat usado en la dinámica de espines	132
A.2 Ejemplo del input usado en Mumax3	133
B Cálculos Complementarios	134
B.1 Interacción dipolar de dos espines perpendiculares a un plano	134
B.2 Resultados Publicados	135

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1	Dominios magnéticos en un material ferromagnético	2
Figura 1.2	Dominios de burbujas magnéticas	3
Figura 1.3	Esquema de una memoria lógica de pared de dominio	5
Figura 1.4	Esquema de la memoria racetrack	7
Figura 2.1	Formación de dominios magnéticos	42
Figura 2.2	Pared de dominio magnético	43
Figura 2.3	DW de Néel y de Bloch	44
Figura 2.4	Otras DW	44
Figura 3.1	Diagrama de flujo de la dinámica de espines	46
Figura 3.2	Esquema implementación Dinámica de espines	50
Figura 3.3	Colapso del diagrama de fase en la técnica de escalamiento	54
Figura 3.4	Ejemplo de entrada de mumax^3	65
Figura 4.1	Representación esquemática de los nanoalambres	68
Figura 4.2	Posición de la DW en un nanoalambre escalado	73
Figura 4.3	Posición de la DW en un nanoalambre real	74
Figura 4.4	Comparación entre el FASD y el mumax^3 con campo cero	76
Figura 4.5	Comparación entre el FASD y el mumax^3 sin campo cero	78
Figura 4.6	Comparación entre el FASD y el mumax^3 : z_w vs H	79
Figura 4.7	Comparación entre el FASD y el <i>Problema Estándar #4</i> del NIST	81
Figura 4.8	Comparación entre el FASD y el <i>Problema Estándar #4</i> del NIST	83

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 4.9	resultados del <i>Problema Estándar #4</i> del NIST	85
Figura 5.1	Vista esquemática de una muestra modulada	89
Figura 5.2	Posición de la DW vs tiempo en nanoalambres sin modulación . . .	90
Figura 5.3	Posición de la DW vs tiempo en nanoalambres modulados	92
Figura 5.4	Concepto de vacancia escalada	96
Figura 5.5	Pared de dominio inicial a $T = 10$ K	97
Figura 5.6	Pared de dominio inicial en 3D	98
Figura 5.7	Propagación de la DW para 1 % de vacancias	99
Figura 5.8	rapidez de propagación vs % de vacancias	100
Figura 5.9	Propagación de la DW para 4 % de vacancias.	102
Figura 5.10	Propagación de la DW para 8 % de vacancias	103
Figura 5.11	Propagación de la DW para 20 % y 50 % de vacancias	104
Figura 5.12	Geometría del defecto extendido	105
Figura 5.13	Propagación de la DW en un defecto extendido de diámetro 9.4 nm. .	106
Figura 5.14	Propagación de la DW en un nanotubo de diámetro interno 9.4 nm. .	107
Figura 5.15	rapidez vs L_D para $D_D = 9.4$ nm.	108
Figura 5.16	Propagación de la DW en un defecto extendido de diámetro 13.3 y 18.8 nm.	109
Figura 5.17	Rapidez vs L_D para $D_D = 9.4, 13.3$ y 18.8 nm.	111
Figura B.1	Dos espines perpendicular a un plano	134

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

Este capítulo presenta una breve revisión de la literatura científica publicada sobre los temas relevantes a la presente investigación: la propagación de paredes de dominio magnéticos, y la técnica de escalamiento usada en el estudio de propiedades magnéticas de nano estructuras. En particular, se resumen varios estudios experimentales y teóricos sobre las paredes de dominio magnéticas, para poner en evidencia la relevancia de este campo desde un punto de vista tanto científico como tecnológico. Se discute además una perspectiva histórica de la técnica de escalamiento y del Fast Monte Carlo, que son precursores del nuevo método desarrollado en esta investigación, así como también una vista histórica del enfoque micromagnético que es el método con la que se realizarán las comparaciones de los resultados de este trabajo. Se proporciona además un esquema detallado de la tesis.

1.1. Propagación de paredes de dominio en nano estructuras

Los materiales ferromagnéticos (FM) exhiben una variedad de fenómenos, uno de ellos es la existencia de dominios magnéticos, pequeñas

regiones espaciales dentro de las cuales la magnetización local está saturada. Estos dominios magnéticos se forman debido a la competencia entre las interacciones de intercambio de corto alcance y la energía magnetostática de largo alcance, bajando la energía total del sistema (Kittel, 2004). Las direcciones de magnetización de diferentes dominios no tienen necesariamente que ser paralelas, y como se muestra en la Fig. 1.1, están separadas por fronteras conocidas como paredes de dominio (DW, por sus siglas en inglés). Dentro de la región de la DW, la dirección de la magnetización va cambiando lentamente desde la dirección de magnetización del un dominio hacia la dirección del dominio contiguo.

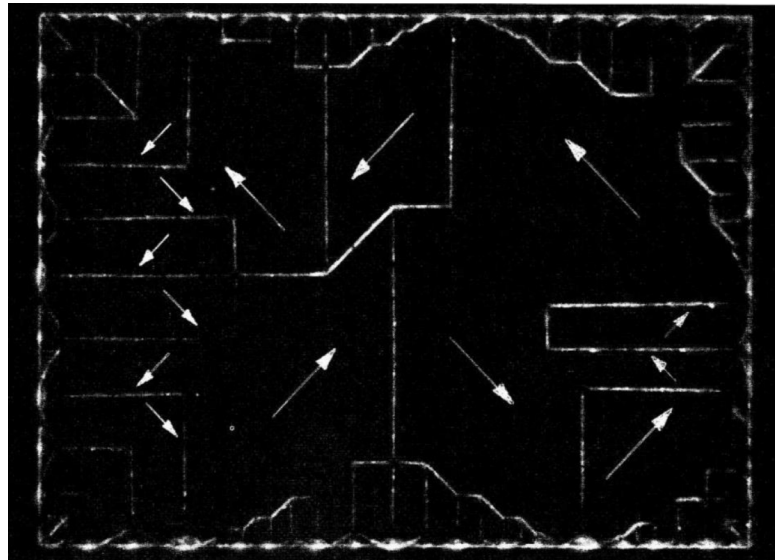


Figura 1.1. Patrón de dominios magnéticos sobre una plaqueta mono cristalina de Ni. Las DWs se visibilizaron mediante el método de Bitter. Imagen tomada de Kittel (2004)

Las DWs desempeñan un papel importante en los procesos de inversión de la magnetización de los materiales magnéticos tanto en sistemas macroscópicos (bulk), como en nanoestructuras. En consecuencia, el comportamiento dinámico de las paredes de dominio magnéticas se ha estudiado intensamente durante muchas décadas (Filippov, 2002). En los

años 1960-1970, se hicieron importantes esfuerzos para comprender la física del movimiento de las DWs en películas delgadas, porque se consideraba que las DWs eran importantes para posibles dispositivos lógicos. Los materiales más investigados fueron los óxidos magnéticos, en particular las orto-ferritas y los granates ferrimagnéticos (Bary'akhtar et al., 1994). Estos materiales se denominan materiales de burbujas magnéticas (magnetic bubbles) debido a la forma de los dominios magnéticos que forman, como se observa en Fig. 1.2. La descripción y comprensión de la dinámica de los dominios de burbujas magnéticas se basaron en las ecuaciones fenomenológicas de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (Malozemoff and Slonczewski, 1979), obteniendo notable concordancia entre las predicciones teóricas de la descripción de la dinámica de magnetización de las burbujas magnéticas y los resultados experimentales de ese período. De hecho, las bases de la dinámica de la DW estaban firmemente establecidas en ese momento.

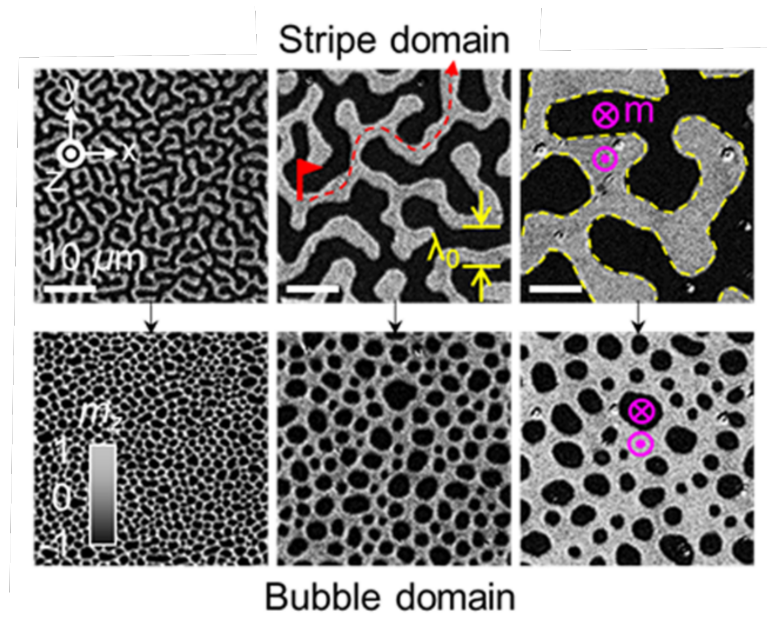


Figura 1.2. Transición desde dominios de banda (stripe domain) a burbujas (bubble domain), al aplicar un campo magnético en el eje Z . El gris claro y oscuro representa la magnetización $+z$ y $-z$, respectivamente. Imagen tomada de Kyoung-Woong et al. (2021)

Sin embargo, la mayoría de los dispositivos basados en las memorias de burbujas no sobrevivieron en el mercado debido a que otras tecnologías le superaban tanto en rendimiento como en costo, y también por algunos problemas técnicos y limitaciones (Matick, 1972; Giess, 1980): (1) estos dispositivos se basaban en el movimiento controlado de burbujas mediante campos magnéticos, se necesitaban electroimanes para generarlos, lo que requería mucho espacio; (2) ya que era necesario mover las burbujas para escribirlas o leerlas, la velocidad operativa de tales dispositivos estaba limitada por la rapidez con la que podían moverse estas burbujas.

Como consecuencia del avance en el control de las rutas de síntesis, así como en los métodos de manipulación de la materia a escala nanométrica, el movimiento de las DWs como aplicaciones tecnológicas tomó nuevamente interés, pero esta vez en nano-estructuras casi unidimensionales (Thomas and Parkin, 2007). El movimiento de las DWs en nanoalambres, y la relación entre la fluctuación térmica, la fijación y la eliminación de las DWs se deben entender para posibles aplicaciones en el campo del almacenamiento magnético. En particular, la manipulación del movimiento de las DWs es la clave para hacer real la próxima generación de tecnología de alto nivel. Por ejemplo, los nanoalambres magnéticos modulados son candidatos adecuados para dispositivos lógicos que permitirían tiempos de conmutación rápidos y no volátiles, y un bajo consumo de energía en el almacenamiento de datos (Nasirpouri et al., 2019).

En 2005, Allwood et al. (2005) propusieron una arquitectura de lógica magnética denominada "domain wall logic", la cual no utiliza transistores y muestra muy poco aumento de calor causado por la conmutación de datos (Fig. 1.3). Ellos sugirieron que los circuitos de los dispositivos electrónicos semiconductores podrían construirse completamente utilizando alambres

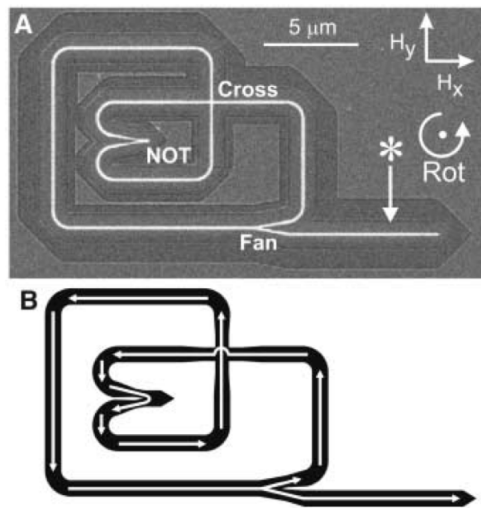


Figura 1.3. Memoria lógica de la DW. (A) Imagen de haz de iones enfocado a un bucle de nanoalambres que contiene una puerta NOT, una unión fan-out y una unión cruzada (cross-over). Las líneas brillantes indican la presencia de material magnético. (B) Diagrama esquemático que ilustra la ruta de una DW que se propaga a través de la estructura en un campo rotante en sentido antihorario. Imagen tomada de Allwood et al. (2005)

magnéticos planos con anchos nanométricos. El principio de funcionamiento de la puerta lógica magnética utiliza un campo giratorio en el plano que actúa como reloj y fuente de alimentación. Las DWs se propagan a través de los nanoalambres y la alta anisotropía de forma de los nanoalambres garantiza que la magnetización prefiera alinearse a lo largo de su eje. En comparación con las puertas lógicas tradicionales basadas en transistores, las puertas lógicas de dominio tienen un diseño geométrico más simple y pueden integrarse en un circuito para realizar cualquier propósito de cálculo computacional, lo que ofrece altas densidades de integración con menor disipación de potencia.

Además de los dispositivos de puerta lógica de pared de dominio, existe otra aplicación potencial basada en el movimiento de DWs en nanoalambres, sugerido por Parkin et al. (2008) como un concepto completamente nuevo para el almacenamiento de datos magnéticos. Se trataba de un revolucionario

dispositivo de memoria tridimensional de bajo costo, pero de alto rendimiento y fiabilidad, basado en el movimiento de las DWs. La memoria “racetrack”, como se la conoce, utiliza DWs magnéticas para almacenar información en altas columnas de material magnético, dispuestas perpendicularmente sobre la superficie de una oblea de silicio. La racetrack consiste en un nanoalambre FM, con información de datos codificada como un patrón de dominios magnéticos a lo largo de una porción del cable, en el que las sucesivas DWs a lo largo del racetrack se alternan entre configuraciones de cabeza-a-cabeza y de cola-a-cola. La separación entre DWs consecutivas, es decir, la longitud del bit, se controla mediante puntos de fijación (muescas) fabricados a lo largo del racetrack, como se muestra en la Fig. 1.4.

Por lo tanto, no importa que aplicación se proponga, el movimiento de las DWs y su interacción con el entorno es un estudio de gran importancia. Principalmente, en estructuras casi-1D como nanocilindros, nanoalambres y nanotubos, se debe entender los procesos de nucleación de las DWs y cuales son los mecanismos físicos de las inversiones de la magnetización con el objetivo de controlar su dinámica, i.e., la propagación de las DWs, su velocidad y su comportamiento en función de la forma, estructura y pureza de los sistemas.

Por otro lado, se ha observado en diferentes nano y micro alambres magnéticos la propagación rápida y controlada de una DW única (SDW por single domain wall) (Moriya et al., 2010; Zhukova et al., 2012), la cual puede ser impulsada por un campo magnético (Varga et al., 2008; Zhukova et al., 2012) o por una corriente eléctrica (Allwood et al., 2005; Zhukova et al., 2018). Dentro de estos estudios se ha reportado que la propagación de las DWs en alambres cilíndricos amorfos micrométricos y nanométricos tienen velocidades muy por encima de 1 km/s (Varga et al., 2008; Óvári

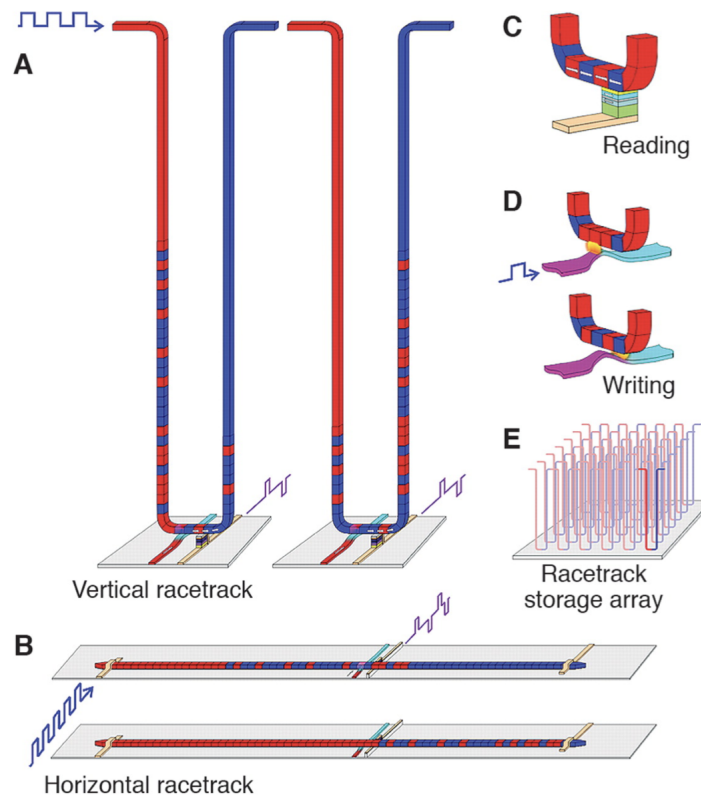


Figura 1.4. Esquema de la memoria racetrack. Vista vertical (A) y horizontal (B) de la configuración. (C) Los datos se leen midiendo la magnetorresistencia de túnel de una unión de túnel magnético (magnetic tunnel junction) conectado al racetrack, y (D) la escritura de datos mediante un campo marginal de una DW que se mueve en un segundo nanoalambre FM en ángulo recto con respecto al nanoalambre de almacenamiento. (E) Arreglo de racetracks verticales en un chip. Imagen tomada de Parkin et al. (2008)

et al., 2011; Zhukova et al., 2012; Zhukov et al., 2013). Sin embargo, estos valores elevados de la velocidad pueden mejorarse considerablemente (hasta 3-4 km/s) mediante un recocido apropiado, mediante un campo magnético transversal, o por anisotropía magnética transversal inducida por un tratamiento térmico (Burrowes et al., 2013; Zhukov et al., 2017; Cortes-León et al., 2020).

No obstante, hay que considerar también que cuando la propagación de la DW es conducida por la aplicación de un campo magnético, su

velocidad pueda estar limitada por el límite de Walker (Schryer and Walker, 1974). Schryer y Walker demostraron que cuando el efecto del campo magnético aplicado es suficiente para superar las fuerzas de fijación de la DW, la velocidad de la pared depende linealmente del campo magnético, correspondiente al movimiento viscoso, y que existen dos regímenes de velocidad lineal, separados por un régimen transitorio complejo, por debajo y muy por encima de un campo umbral (llamado campo de Walker) que delinea la estabilidad de la estructura de la pared. En cada régimen lineal, se ha establecido una relación entre la movilidad de la pared y el parámetro intrínseco de amortiguamiento de Gilbert (Gilbert, 1955), y entre la movilidad de la pared y el ancho de la pared en el dominio dinámico (Slonczewski, 1972; Schryer and Walker, 1974). Existe en la literatura una dispersión significativa en la interpretación de las mediciones de velocidad en nanoalambres (Ono et al., 1999; Atkinson et al., 2003; Beach et al., 2005; Hayashi et al., 2006), particularmente en relación con los parámetros de amortiguación extraídos de estos últimos. Esta dispersión, abordada en parte por Beach et al. (2005), muestra cuán crucial es el conocimiento del campo de Walker.

Hay que enfatizar el hecho que, a diferencia de las estructuras magnéticas microscópicas, en nanoalambres suficientemente angostos hechos de materiales magnéticos blandos (e.g. permalloy $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$) las estructuras de dominio de flujo cerrado no son energéticamente favorables. Por esta razón, debido a la anisotropía de forma, los dominios magnéticos están alineados a lo largo del nanoalambre con magnetizaciones apuntando una hacia (opuesta a) la otra. Estos dominios están separados por DWs cabeza-a-cabeza (o cola-a-cola). McMichael and Donahue (1997) estudiaron por primera vez la estructura de las DWs cabeza-a-cabeza mediante simulaciones micromagnéticas y encontraron que existían dos estructuras de DW distintas:

la pared transversal y la pared de vórtice. Nakatani et al. (2005) identificaron un estado magnético intermedio entre las paredes transversales y vórtices, que lo identificaron como una pared transversal asimétrica. La estabilidad relativa de estas paredes fue estudiada por Youk et al. (2006), calculando la energía de la pared de vórtice como función de la posición de su núcleo con respecto al centro del nanoalambre. Ellos demostraron que la pared de vórtice tiene el estado de energía más baja cuando su núcleo está en el centro del alambre.

También se han encontrado estructuras de DWs cabeza-a-cabeza más complejas en nanoalambres magnéticos, dependiendo de su tamaño y de la relación de aspecto de su sección transversal. Por ejemplo, se ha observado estructuras de dos vórtices de quiralidad opuesta (Florez et al., 2005; Thomas and Parkin, 2007), en alambres de permalloy de más de 20 nm de espesor. En alambres angostos con secciones transversales circulares o cuadradas, también puede aparecer una pared de vórtice, con el núcleo del vórtice paralelo al eje longitudinal del alambre. Esta estructura ha sido descrita por Thiaville and Nakatani (2006) como un vórtice con punto de Bloch (Bloch-point vortex). Las DWs cara-a-cara solo son estables en nanoalambres con anisotropía de forma fuerte y/o anisotropía uniaxial a lo largo de la dirección de los nanoalambres, pero en presencia de una anisotropía cristalina significativa en las direcciones transversales dentro del plano o fuera del plano, se pueden observar otros patrones de dominio incluso para alambres nanométricos (Wunderlich et al., 2001; Cayssol et al., 2004).

Más recientemente, Caso et al. (2023) investigaron las propiedades estáticas y dinámicas (modos de onda de espín) de nanoalambres magnéticos cilíndricos cortos, donde los estados fundamental (vórtice) y metaestable (con una DW de vórtice con punto de Bloch) tienen energías similares. Ellos demostraron que se puede obtener un control reversible efectivo de

la topología de la textura de magnetización 3D (que se puede conmutar entre estos dos estados) mediante el uso de excitación de microondas cortas de baja potencia. Este mecanismo se podría utilizar en dispositivos que impliquen la excitación por microondas y la generación de corrientes de espín opuestas a través del torque de espín-órbita, i.e., a la creación de memorias magnéticas topológicas. De la misma manera, Zhou et al. (2023) estudiaron un nano-oscilador de espín con oscilación constante de la DW en nanoalambres tipo Z con anisotropía magnética perpendicular mediante simulaciones micromagnéticas. Sus resultados demuestran que el comportamiento dinámico de las DWs en las uniones Z dependen fuertemente de la dimensión de las uniones Z y la densidad de corriente, encontrando tres tipos de comportamientos: oscilación amortiguada, oscilación estable y colapso. La oscilación estable se puede utilizar como nano-osciladores de torque de espín de altas frecuencias para nuevos emisores de microondas.

También se han realizado muchos trabajos en el estudio de la influencia de la temperatura en la dinámica de las DWs (Yu et al., 2010; Schlickeiser et al., 2014; Tolley et al., 2015; Yan et al., 2015; Duranka et al., 2018), no solamente por los efectos que tiene el desorden introducido por la temperatura sobre el movimiento de las DWs, sino también por las implicaciones prácticas en los dispositivos tecnológicos. Desde un punto de vista práctico, por ejemplo la temperatura puede cambiar la anisotropía magnetoelástica y amplificar las tensiones en los microalambres inducidas durante el proceso de fabricación, lo cual afecta el movimiento de la DW (Horniaková et al., 2023). Desde un punto de vista básico, ya que la inversión de la magnetización en un campo antiparalelo ocurre como un evento de nucleación en algún punto del sistema y se propaga a través del material formando un solo dominio, la nucleación es uno de los ingredientes importantes que se debe

comprender. La nucleación puede ocurrir debido a fuentes intrínsecas o extrínsecas (Mohakud et al., 2016); las fluctuaciones térmicas del material constituyen una fuente intrínseca de nucleación, mientras que las fuentes extrínsecas se deben a la estructura no homogénea del material (desalineación del eje fácil e impurezas, etc.). Además, se ha demostrado que la temperatura influyen en la velocidad de propagación de las DWs, y que se puede controlar mediante gradientes de temperatura (Tolley et al., 2015; Mazo-Zuluaga et al., 2016).

Por lo tanto, el movimiento de las paredes de dominio en nanoalambres magnéticos inducido por agentes externos (corriente, campo magnético, temperatura, microondas, etc.) es todavía un tema desafiante de investigación que se ha desarrollado rápidamente por sus amplias posibilidades en aplicaciones tecnológicas y por la variedad de estados magnéticos que se pueden obtener para estudios de propiedades básicas en su dinámica, como también se pueden manipular para utilizarlos en una variedad de dispositivos.

1.2. Desarrollo de la técnica de escalamiento en nanoestructuras

El estudio teórico de las diferentes propiedades magnéticas de nanoestructuras se ha realizado, además de las tradicionales soluciones analíticas que consideran aproximaciones a la solución de las ecuaciones dinámicas, usando simulaciones computacionales que dan resultados imitando el comportamiento dinámico de un sistema. En cada caso, el estudio de la dinámica de espines se realiza usando la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (Landau and Lifshitz, 1935; Lakshmanan, 2011), que es la ecuación fundamental en el magnetismo aplicado.

Al centrarse en el campo de simulaciones, las investigaciones se han

realizado usando diferentes estrategias. Una de ellas es el micromagnetismo (Brown, 1963; Aharoni, 2000; Prohl et al., 2001; Exl et al., 2020), el cual considera el sistema desde un punto de vista macroscópico como un continuo, y en esta aproximación resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de LLG que se obtiene al aplicar la ecuación continua de LLG a cada volumen microscópico en el que se divide el sistema. Este enfoque aplicado a las DWs magnéticas han dado buenos resultados y en buena concordancia con los hallazgos experimentales (Vargas et al., 2006; Mejía-López et al., 2010; Schlickeiser et al., 2014; Yan et al., 2015).

Otro enfoque utilizado es considerar el carácter atomístico discreto del sistema a través de simulaciones de Monte Carlo (MC) (Landau and Binder, 2021), mediante las cuales se pueden explorar promedios térmicos en el ensamble canónico de las propiedades magnéticas, una vez que se establece un Hamiltoniano adecuado que describe el sistema. Sin embargo, considerando que en nano estructuras la interacción dipolar de largo alcance es importante, el uso de simulaciones de MC lleva a un problema de tiempo computacional. Esto es debido a que, por ejemplo, un sistema de $30 \times 30 \times 30$ nm con estructura cristalina cúbica de parámetro de red 2 \AA tiene 3.375×10^6 espines, lo cual al considerar interacciones de cada espín con todos los espines del sistema, llevaría a tiempos de simulación del orden de 50 horas por cada paso de MC en un computador serial (~ 5 años en una simulación con solo 1000 pasos de MC).

Para tener en cuenta el efecto de las interacciones dipolares en el cálculo de los estados magnéticos en sistemas nanométricos, d'Albuquerque e Castro et al. (2002) introdujeron la Técnica de Escalamiento (ST por sus siglas en inglés) que representa una estrategia útil (Mejía-López et al., 2005; Bahiana et al., 2006; Vargas et al., 2006; Mejía-López et al., 2010). En este

método, el diagrama de fases magnético de un sistema se puede obtener a partir de un sistema más pequeño con dimensiones escaladas, con la gran ventaja de reducir fuertemente el tiempo de cómputo.

Mejía-López et al. (2005) propusieron combinar las simulaciones MC con el esquema ST para estudiar sistemas magnéticos fuera de equilibrio, como el ciclo de histéresis, de una manera más eficiente. Luego, a partir de 2006, otros autores aplicaron dicha combinación y comenzaron a llamarlo el método "Fast Monte Carlo" (FMC) (Vargas et al., 2006; Bahiana et al., 2006). A partir de ese momento, varios sistemas han sido estudiados exitosamente con este método (Landeros et al., 2007; Allende et al., 2008; Zhang et al., 2008; Allende et al., 2009a,b; Landeros et al., 2009; Zhang and Haas, 2010). Aquí también se ha encontrado una buena concordancia con los experimentos (Mejía-López et al., 2006, 2010).

Velásquez et al. (2013) incluyeron la temperatura en la ST, estudiando la relación de escalamiento de la temperatura, para obtener valores confiables de la temperatura crítica de un nanosistema magnético a través del método FMC. Esto es importante ya que una gran cantidad de experimentos se realizan a temperatura ambiente.

Sin embargo, ya en el 2008 se había iniciado un debate sobre el valor del exponente de escalamiento η dentro del ST, respecto del valor sugerido 0.55, proveniente de un cálculo analítico (Landeros et al., 2005), y el valor 0.5, obtenido desde un punto de vista micromagnético (Zhang et al., 2008). Velásquez et al. (2015) abordaron el debate relacionado sobre el valor de η y propusieron una solución presentando una formulación generalizada para la utilización de la ST.

Recientemente, el método FMC ha sido usado para estudiar el control de la nucleación y de la propagación de DWs mediante gradientes de

temperaturas (Mazo-Zuluaga et al., 2016); las propiedades magnéticas de nanoalambres y nanorods core/shell Fe/Ni (Velásquez et al., 2017), la estructura de los dominios magnéticos en la mesoescala (Radhakrishnan et al., 2017); los efectos dipolares en las fases magnéticas de clústeres superparamagnéticos (Pedrosa et al., 2018); la estabilización de una SDW en nanoalambres magnéticos mediante gradientes de temperatura (Mejía-López et al., 2018); diagramas de fases, magnetorresistencia e inversión magnética en nano puntos cilíndricos segmentados de Ni-Fe con tamaño y composición ajustables para aplicaciones tecnológicas (Velásquez et al., 2023).

Un inconveniente en el uso de métodos estocásticos basados en Monte Carlo para el estudio de la dinámica en nanoestructuras es que la evolución temporal se describe en términos de pasos de Monte Carlo, una unidad que no puede asociarse directamente con el tiempo físico real. Esto contrasta con los enfoques dinámicos basados en la ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert, utilizados tanto en modelos atomísticos como micromagnéticos, donde el tiempo constituye una magnitud física bien definida. Si bien las simulaciones micromagnéticas permiten acceder a escalas temporales realistas de manera eficiente, pierden información atomística relevante, mientras que los modelos discretos enfrentan costos computacionales prohibitivos para sistemas de tamaño real. Esta situación pone de manifiesto una brecha metodológica en la descripción cuantitativa de la dinámica magnética a escala nanométrica.

1.3. Breve historia del Micromagnetismo

La teoría del micromagnetismo se desarrolló mucho antes del avance de la tecnología informática moderna, y fue propuesta por William Brown Jr. a finales de los años cincuenta (Brown Jr, 1959). En este enfoque se utiliza un

vector de magnetización continuo para describir los detalles de la región de transición entre dominios magnéticos (Landau and Lifshitz, 1935) en lugar de tener en cuenta los momentos atómicos individuales.

Después de la explicación del ferromagnetismo por parte de Heisenberg (Heisenberg, 1928) y Dirac (Dirac, 1928) basados en las interacciones de intercambio, se abrió la puerta hacia una teoría mesoscópica del magnetismo que combina la teoría de Maxwell y la teoría cuántica. Un primer intento de tratar los estados magnéticos no homogéneos se debe a Bloch (Bloch, 1932), quien demostró que debido a las interacciones de intercambio las regiones de transición entre los dominios magnéticos de Weiss (Weiss, 1907) tienen un ancho finito. Bloch consideró una especie de pared de dominio y despreció la energía del campo dipolar, que ahora se conoce como pared de dominio de Bloch. Más tarde, Néel (Néel, 1955a,b) describió diferentes tipos de paredes de dominio y dio el primer cálculo aproximado de lo que hoy se conoce como pared de dominio de Néel.

El avance hacia una teoría del magnetismo en la aproximación al continuo, se debe a Landau y Lifshitz (Landau and Lifshitz, 1935), quienes derivaron una expresión del continuo para la energía de intercambio y dieron la primera interpretación de los patrones de dominio. Para un mayor desarrollo de la teoría mesoscópica, el libro de Becker y Döring (Becker and Döring, 1939) fue de gran importancia ya que aquí, por primera vez, se consideró la interacción entre la magnetización y las microestructuras mediante la derivación de la llamada energía de acoplamiento magnetoelástica para cristales cúbicos. Fueron los avances realizados en los años treinta del siglo XX con respecto a las microestructuras, lo que inspiró a Brown (Brown Jr, 1940, 1941) a publicar dos artículos básicos de los cuales surgió la teoría moderna del

micromagnetismo. En estos artículos, Brown consideró por primera vez el efecto de las perturbaciones locales de la dirección de magnetización sobre la ley de aproximación a la saturación ferromagnética para encontrar una explicación para el término $\frac{1}{H}$ que se encuentra experimentalmente. Hubo otros artículos de Kittel (Kittel, 1949), Stoner-Wohlfarth (Stoner and Wohlfarth, 1948), Néel (Néel, 1947), Aharoni (Aharoni and Shtrikman, 1958) y, por supuesto, también de Brown (Brown Jr, 1957) en la década de 1950, quienes establecieron la teoría del micromagnetismo como una herramienta eficaz para describir los procesos de magnetización y las propiedades características de la histéresis.

Desde mediados del decenio de 1980, la mayor disponibilidad de potencia informática a gran escala permitió el estudio de un comportamiento físico cada vez más detallado, lo que repercutió en el rápido desarrollo tecnológico de los materiales magnéticos avanzados. Por ejemplo, resultados numéricos en el estudio de la inversión de la magnetización en partículas ferromagnéticas mostraron que los fuertes campos de dispersión (stray field), que provocan una disposición no homogénea de la magnetización, influyen drásticamente en el proceso de inversión (Victoria, 1988; Yan and Della Torre, 1988; Schabes, 1991). Debido a los efectos de los campos de dispersión, la dependencia angular del campo de nucleación de partículas no elipsoidales se desvía considerablemente de los resultados clásicos (Schmidts et al., 1992). En consecuencia, las interacciones entre partículas afectan las propiedades magnéticas de los materiales ferromagnéticos. Fukunaga e Inoue (Fukunaga and Inoue, 1992) investigaron los efectos del intercambio entre granos y las interacciones magnetostáticas sobre la remanencia y la coercitividad para un modelo de imán isotrópico compuesto de partículas cúbicas. Los resultados muestran que las interacciones de intercambio entre granos aumentan la

remanencia y reducen el campo coercitivo de los imanes permanentes isotrópicos.

Hernando et al (Hernando et al., 1992) presentaron un modelo micromagnético unidimensional para investigar las interacciones de intercambio entre granos en materiales magnéticos duros. La formación de una distribución de magnetización similar a una pared de dominio en la interfaz entre granos vecinos con diferente orientación reduce drásticamente el campo de nucleación. Yang y Fredkin (Yang and Fredkin, 1998) desarrollaron nuevos procedimientos numéricos que describen el comportamiento dinámico mediante el método de elementos finitos en sistemas micromagnéticos tridimensionales. Se han utilizado modelos micromagnéticos para derivar las propiedades de grabación en películas delgadas de doble capa (Zhu, 1992; Oti, 1993). Vos et al (Vos et al., 1993) desarrollaron un modelo micromagnético para investigar los efectos de interacción en medios de grabación de partículas. Los resultados numéricos obtenidos para un conjunto de partículas elipsoidales muestran que la interacción entre la forma de las partículas y las interacciones magnetostáticas afecta significativamente la coercitividad y la cuadratura coercitiva.

Mientras que en la segunda mitad del siglo XX el micromagnetismo se aplicó principalmente a los problemas clásicos de los materiales ferromagnéticos, en el siglo XXI los problemas de la magnetoelectrónica y la espintrónica cobraron relevancia. Aquí los recientes desarrollos en micromagnetismo computacional juegan un papel importante. Estas técnicas permiten soluciones de ecuaciones micromagnéticas no lineales, la determinación de la distribución de espín de estados fundamentales magnéticos, la determinación de configuraciones de un solo dominio y de

estados de vórtice, así como la investigación de la dinámica de los procesos de magnetización. Otro problema de gran interés son las relaciones entre microestructuras y procesos de magnetización. Dado que hoy en día las microestructuras de nanocristales y las estructuras de películas delgadas son problemas dominantes en los dispositivos magnéticos, el micromagnetismo se ha convertido en una herramienta versátil para tratar muchos problemas abiertos.

Uno de estos problemas abiertos es la dinámica de paredes de dominio. La comprensión matemática de los perfiles de pared de dominio en ferroimanes se ha basado generalmente en el marco de modelado micromagnético, mediante el cual las configuraciones de magnetización que representan estos perfiles se consideran minimizadores locales o globales de la energía micromagnética funcional (Hubert and Schäfer, 1998). Este enfoque se ha utilizado con éxito para caracterizar una gran variedad de paredes de dominio y otras configuraciones de magnetización (DeSimone et al., 2006; Chermisi and Muratov, 2013; Döring et al., 2014; Ignat and Moser, 2017; Lund et al., 2018; Knüpfner et al., 2019). Sin embargo, las paredes de dominio head-to-head plantean un desafío fundamental para el modelado y análisis micromagnético, ya que estas configuraciones de magnetización llevan una carga magnética distinta de cero, lo que puede conducir a una divergencia de la energía de la pared en infinitas muestras debido a comportamientos singulares de los campos de dispersión (Lund et al., 2018). Hasta la fecha, ha habido sólo pocos estudios micromagnéticos de tales paredes de dominio cargadas (Harutyunyan, 2014, 2016; Lund et al., 2018, 2020; Knüpfner and Shi, 2021).

1.4. Estructura de la tesis

Después de presentar una introducción general (capítulos 2 y 3) de los enfoques teóricos y métodos numéricos utilizados para investigar la propagación de paredes de dominio en nano estructuras, organizamos los resultados de la tesis en dos partes: En la primera parte (capítulo 4), demostramos que la técnica de escalamiento se puede combinar con simulaciones de dinámica molecular, implementando el método que llamamos dinámica molecular rápida (Fast Molecular Dynamics FMD); en la segunda parte (capítulos 5) aplicamos FMD a sistemas modulados y a sistemas con defectos. Los capítulos están organizados de la siguiente manera:

- En el **Capítulo 2**, se presenta los conceptos teóricos básicos de las interacciones magnéticas. Se proporciona una descripción de la ecuación LLG y además se realiza una revisión de los estados magnéticos. Los conceptos presentados en este capítulo son necesarios para una comprensión de los resultados presentados en los siguientes capítulos de la tesis.
- En el **Capítulo 3** se introduce los enfoques numéricos que se usan en esta investigación. En particular, se introduce formalmente la ST, las simulaciones de dinámica molecular (MD) y el micromagnetismo como está implementado en el mumax3.
- En el **Capítulo 4** se presenta un estudio de la combinación del enfoque MD con la ST, que llamamos "Fast Spin Dynamics"(FASD), y su utilidad para estudiar propiedades físicas de fenómenos dependientes del tiempo en sistemas nanométricos. En particular, se prueba la

confiabilidad del novedoso enfoque FASD comparándolo con cálculos micromagnéticos, usando un fenómeno bien conocido como es el movimiento de las DWs en nanoalambres ferromagnéticos, así como también en la evolución dinámica del estado S en Permalloy. En base al contenido desarrollado en este capítulo, se elaboró un artículo científico que fue publicado en la revista *Advanced Theory and Simulations*. Dicho artículo se adjunta como anexo al final de esta tesis.

- En el **Capítulo 5** se aplicam este novedoso esquema para estudiar el movimiento DW en nanocables FM de diámetro modulado, cuyos resultados podrían ser de interés técnico para la investigación tecnológica actual, así como también en el estudio de la velocidad de propagación de la DW en nanoalambres que contienen defectos.

Capítulo 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1. Conceptos básicos del magnetismo

El magnetismo surge de las propiedades de los átomos en los materiales, particularmente de los electrones que forman parte de estos átomos. Los electrones tienen un momento angular intrínseco o espín \vec{S} y un momento angular orbital \vec{L} . Por tanto, el electrón tiene un momento dipolar magnético $\vec{\mu}$ asociado con su espín intrínseco, tal que (Lukaszew, 2015):

$$\vec{\mu}_S = -(e/m)\vec{S}, \quad (2.1)$$

donde e ($= 1.6 \times 10^{-19}$ C) es la carga del electrón y m ($= 9.11 \times 10^{-31}$ kg) es la masa del electrón. El signo menos indica que \vec{S} y $\vec{\mu}$ tienen orientación opuesta. Es importante señalar que ni \vec{S} ni $\vec{\mu}$ se pueden medir directamente, sólo se puede medir una componente a lo largo de cualquier eje. Además, dado que \vec{S} está cuantificado, se deduce que $S_z = m_s \hbar$, con $m_s = \pm 1/2$ y \hbar la constante de Planck h dividido para 2π . Entonces, la componente z del momento magnético es

$$\mu_{S,z} = -(e/m)S_z = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_B, \quad (2.2)$$

con $\mu_B (= 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T})$ el magneton de Bohr. De manera similar, el momento magnético orbital del electrón es

$$\vec{\mu}_L = -(e/2m)\vec{L} = \gamma\vec{L}, \quad (2.3)$$

donde $\gamma = -e/2m$ es una constante conocida como la razón giromagnética.

En el electromagnetismo clásico, $\vec{\mu}$ se puede explicar mediante la imagen de un bucle de corriente. Suponiendo una corriente I alrededor de un bucle infinitamente pequeño que tiene una área $d\vec{A}$, el momento magnético correspondiente $d\vec{\mu}$ es igual a:

$$d\vec{\mu} = Id\vec{A}. \quad (2.4)$$

Sumar los momentos magnéticos de estos “pequeños” bucles permite calcular el momento magnético $d\vec{\mu}$ para un bucle de tamaño finito:

$$\vec{\mu} = \int d\vec{\mu} = I \int d\vec{A}, \quad (2.5)$$

porque las corrientes de los bucles vecinos se cancelan entre sí y solo dejan que la corriente circule alrededor del perímetro del bucle de tamaño finito (Getzlaff, 2007).

El dipolo magnético equivale al momento magnético de un bucle de corriente en el límite de una área pequeña pero de momento finito. La energía de un momento magnético viene dada por:

$$E = -\mu_0\vec{\mu} \cdot \vec{H} = -\mu_0\mu H \cos \theta, \quad (2.6)$$

siendo θ el ángulo entre el momento magnético $\vec{\mu}$ y un campo magnético externo \vec{H} y μ_0 la permeabilidad magnética en el vacío. De este modo, la

energía se minimiza cuando el momento magnético se encuentra a lo largo del campo magnético. Como el campo magnético externo está relacionado con la inducción magnética \vec{B} mediante la relación $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ (ver más abajo la ec. 2.11), entonces la energía (2.6) se puede escribir simplemente como

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} . \quad (2.7)$$

Existe también un torque $\vec{\mathcal{T}}$ en el momento magnético dado por (Blundell, 2001)

$$\vec{\mathcal{T}} = \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H} = \vec{\mu} \times \vec{B} , \quad (2.8)$$

que tiende a hacer girar el momento magnético hacia el campo magnético. Como el momento magnético está asociado con el momento angular mediante la ecuación (2.3), y debido a que el torque es igual a la rapidez de cambio del momento angular, la ecuación (2.8) se puede reescribir como

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H} = \gamma \vec{\mu} \times \vec{B} . \quad (2.9)$$

Esto significa que el cambio en $\vec{\mu}$ es perpendicular tanto a $\vec{\mu}$ como a \vec{B} . Es decir, en lugar de que $\vec{\mu}$ gire hacia \vec{B} , el campo magnético hace que la dirección de $\vec{\mu}$ precese alrededor de \vec{B} . La ecuación (2.9) también implica que $|\vec{\mu}|$ es independiente del tiempo.

Para un sistema de N átomos, se define la magnetización \vec{M} como el momento magnético total del sistema por unidad de volumen

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i^N \vec{\mu}_i . \quad (2.10)$$

Generalmente la magnetización se calcula en una escala de longitud lo

suficientemente grande como para poder realizar un promedio de al menos varios momentos magnéticos atómicos.

En un material magnético, considerado como un número muy grande de momentos magnéticos atómicos, el campo magnético externo \vec{H} y la inducción magnética \vec{B} (la cual es una propiedad característica del propio material) pueden diferir tanto en magnitud como en dirección debido a la magnetización:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) . \quad (2.11)$$

Note que en el vacío se recupera la relación $B = \mu_0 \vec{H}$.

Se tiene que enfatizar además que, aunque se puede describir clásicamente el efecto de campos magnéticos externos en materiales magnéticos, el magnetismo es un concepto puramente cuántico. En efecto, el Teorema de Bohr-van Leeuwen demuestra que en un sistema de momentos magnético clásicos se tiene siempre $\langle M \rangle = 0$. La demostración se basa en el hecho de que el efecto de \vec{B} sobre N partículas se puede incluir en la energía del sistema reemplazando el momento \vec{p}_i de las partículas con $\vec{p}_i - q\vec{A}$ (Jackson, 2021), donde q es la carga de la partícula y \vec{A} el potencial vectorial. Este desplazamiento puede reabsorberse en la integral que define la función de partición, i.e., en un sistema clásico la función de partición y por tanto su energía libre son independientes de \vec{B} . La demostración completa se puede ver por ejemplo en Aharoni (2000).

En el caso especial de que la magnetización esté relacionada linealmente con el campo magnético, el sólido se llama material lineal y se puede escribir:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} , \quad (2.12)$$

donde χ es una cantidad adimensional llamada susceptibilidad magnética, la cual indica que tan sensible es un material cuando se somete a un campo magnético externo. De esta manera se pueden clasificar los materiales como diamagnéticos cuando $\chi < 0$ y paramagnéticos si $\chi > 0$.

Todos los materiales muestran algún grado de diamagnetismo y una susceptibilidad magnética débil. En estos casos, un campo magnético induce un momento magnético que se opone al campo magnético aplicado que lo provocó. Este efecto se discute a menudo desde un punto de vista clásico: la acción de un campo magnético sobre el movimiento orbital de un electrón provoca una f.e.m. inversa, que según la ley de Lenz se opone al campo magnético que la provoca. Sin embargo, el teorema de Bohr-van Leeuwen debería hacernos desconfiar de enfoques que intentan demostrar que la aplicación de un campo magnético a un sistema clásico puede inducir un momento magnético. El fenómeno del diamagnetismo es enteramente mecánico cuántico y debería ser tratado como tal (Blundell, 2001).

En los materiales paramagnéticos un campo magnético aplicado induce una magnetización que se alinea paralela al campo magnético aplicado que la provocó. En este caso es importante que los átomos tengan un momento magnético propio (debido a electrones desapareados). Sin un campo magnético aplicado, estos momentos magnéticos apuntan en direcciones aleatorias debido a que la interacción entre ellos es débil comparada a la energía térmica. La aplicación de un campo magnético los alinea; el grado de alineación (y por tanto la magnetización inducida) depende de la intensidad del campo magnético aplicado.

Por otro lado, cuando las interacciones entre los momentos magnéticos de los átomos en el material es mucho mayor que la energía térmica, los momentos magnéticos del sistema se ordenan. Este ordenamiento se presenta

en forma paralela en los materiales conocidos como ferromagnetos, y de manera antiparalela para materiales antiferromagnéticos y ferrimagnéticos. Este efecto es debido principalmente a la interacción de intercambio, la cual será descrita en la siguiente sección (Sec. 2.2). En cada caso, al aumentar la temperatura en estos materiales habrá un momento en que la energía térmica empieza a dominar y el sistema se desordenará. Esta temperatura crítica de orden-desorden se le llama temperatura de Curie para los materiales ferromagnéticos, y temperatura de Néel para los materiales anti- y ferrimagnéticos.

2.2. Interacciones magnéticas en materiales

Es muy importante estudiar el sistema magnético desde el punto de vista energético, ya que con estas interacciones se puede explicar la formación de dominios magnéticos y el movimiento de las DWs que trata esta tesis. En esta sección, resumiremos las cuatro energías más importantes: la energía dipolar, la energía de intercambio, la energía de anisotropía y la energía de Zeeman.

Interacción Dipolar Magnético

La interacción dipolar, la cual es una interacción de largo alcance, es responsable de la estabilización de las paredes de los dominios y de la nucleación de los dominios magnéticos. Por esta razón, a menudo se lo denomina campo desmagnetizante.

La energía debido a la interacción de dos dipolos magnéticos, $\vec{\mu}_1$ y $\vec{\mu}_2$, separados por el vector \vec{r} está dada por:

$$E_D = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}) \right], \quad (2.13)$$

y por lo tanto depende de su distancia y de sus orientaciones relativas, i.e., es un término no local.

Para realizar una estimación del orden de magnitud de esta interacción, consideremos valores típicos con $\mu_1 = \mu_2 = 1\mu_B$, $r = 2 \text{ \AA}$, y supongamos que $\vec{\mu}_1 \parallel \vec{\mu}_2$ y $\vec{\mu} \parallel \vec{r}$, entonces se tiene

$$E_D = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{2\pi r^3} = 2.1 \times 10^{-24} \text{ J}, \quad (2.14)$$

La temperatura correspondiente a este valor ($E = k_B T$) está muy por debajo de 1K. Sin embargo, la temperatura de orden normalmente alcanza valores de varios cientos de grados Kelvin (1040 K para el Fe). Por lo tanto, la interacción dipolar magnética es demasiado pequeña para ser la responsable del ferromagnetismo. Sin embargo, debido a su carácter de largo alcance es un término muy importante en nanoestructuras porque modifica los estados magnéticos del sistema, generando por ejemplo vórtices como estado magnético fundamental en nanocilindros (Velásquez et al., 2013).

Considerando las relaciones cuánticas (2.1), (2.2) y (2.3), podemos relacionar el momento magnético con el espín total \vec{S} (espín electrónico y momento angular orbital) de cada átomo:

$$\vec{\mu} = g\mu_B \hbar \vec{S} = g\mu_B \vec{s}, \quad (2.15)$$

donde $\vec{s} = \hbar \vec{S}$ representará el espín clásico. g es conocido como factor de Landé y se expresa en función de los números cuánticos de espín S , momento angular L y momento angular total J como (Kittel, 2004):

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (2.16)$$

Note que para el espín electrónico, $S = \frac{1}{2}$, $L = 0$ y $J = \frac{1}{2}$, se tiene $g = 2$ y la ecuación 2.15 se reduce a la ecuación 2.1,

Por lo tanto, podemos escribir la energía dipolar para N espines clásicos como

$$E_D = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{4\pi} \sum_{i,j=1; i \neq j}^N g_i g_j \left[\frac{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{s}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (2.17)$$

con g_i y g_j los factores de Landé para los espines i y j respectivamente, y $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ la posición relativa del espín j con respecto al espín i .

Interacción de Intercambio

El intercambio interatómico entre momentos magnéticos localizados en átomos individuales está bien descrito por las interacciones de Heisenberg J_{ij} entre espines atómicos de magnitud constante. Dependiendo del signo positivo o negativo de J_{ij} , el intercambio favorece la alineación paralela o antiparalela de los espines vecinos, lo que a menudo se traduce en orden ferromagnético (FM), ferrimagnético (FI) o antiferromagnético (AFM).

Para explicar el origen de este término, supongamos un modelo en el que se tiene sólo dos electrones con vectores de posición \vec{r}_1 y \vec{r}_2 y funciones de onda $\psi_a(\vec{r}_1)$ y $\psi_b(\vec{r}_2)$. Por el principio de exclusión de Pauli, la función de onda total del sistema debe ser antisimétrica, entonces teniendo en cuenta el espín de los electrones hay dos posibilidades: (1) una parte espacial simétrica ψ en combinación con una parte de espín antisimétrica χ , o (2) una parte

espacial antisimétrica con una parte de espín simétrica. La primera situación representa un estado singlete con $S_{tot} = 0$, la segunda un estado triplete con $S_{tot} = 1$. Las funciones de onda totales correspondientes a cada una de ellas son (Getzlaff, 2007):

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) + \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)] \cdot \chi_S , \quad (2.18)$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)] \cdot \chi_T , \quad (2.19)$$

con las energías del singlete y del triplete dadas por

$$E_S = \int \psi_S^* \mathcal{H} \psi_S dV_1 dV_2 , \quad (2.20)$$

$$E_T = \int \psi_T^* \mathcal{H} \psi_T dV_1 dV_2 . \quad (2.21)$$

Teniendo en cuenta las partes de espín normalizadas de las funciones de onda singlete y triplete, i.e.,

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 , \quad (2.22)$$

y que $S_1 = S_2 = 1/2$, obtenemos:

$$\begin{aligned} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= \frac{1}{2} S_{tot}(S_{tot} + 1) - \frac{1}{2} S_1(S_1 + 1) - \frac{1}{2} S_2(S_2 + 1) = \\ &= \frac{1}{2} S_{tot}(S_{tot} + 1) - \frac{3}{4} , \end{aligned}$$

o sea,

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4} & \text{para } S_{tot} = 0 \text{ (singlete)} \\ +\frac{1}{4} & \text{para } S_{tot} = 1 \text{ (triplete)} \end{cases} \quad (2.23)$$

El Hamiltoniano efectivo se puede expresar como:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S + E_T)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.24)$$

El primer término es constante y a menudo se incluye en otras contribuciones energéticas. El segundo término depende del espín y es el más importante en relación con las propiedades de ordenamiento magnético de los materiales.

Definamos la constante de intercambio o integral de intercambio J por:

$$J = E_S - E_T = 2 \int \psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2)\mathcal{H}\psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)dV_1dV_2. \quad (2.25)$$

Entonces, el término dependiente del espín en el Hamiltoniano efectivo se puede escribir como:

$$\mathcal{H}_{spin} = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.26)$$

Si la integral de intercambio J es positiva entonces $E_S > E_T$, i.e., se favorece energéticamente el estado triplete con $S_{tot} = 1$. Si la integral de intercambio J es negativa, entonces $E_S < E_T$, i.e., se favorece energéticamente el estado singlete con $S_{tot} = 0$.

El Hamiltoniano de Heisenberg describe correctamente la parte magnética del sistema, donde la constante de intercambio J representa la intensidad de la interacción y que depende de la superposición de las funciones de onda espaciales de cada electrón, como se observa en la ec. (2.25). Generalizando este resultado a un sistema de N átomos que interactúan magnéticamente con una intensidad J_{ij} entre el i -ésimo y el j -

ésimo átomo, el modelo de Heisenberg lleva a un término en el Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.27)$$

donde el factor $1/2$ se incluye para evitar un doble conteo en las interacciones. El intercambio es una interacción muy importante y es la razón principal del ordenamiento magnético ya que puede favorecer la alineación de espines paralelos o antiparalelos.

Existen diferentes tipos de intercambio en los materiales. El intercambio directo es cuando los electrones de átomos vecinos interactúan directamente a través de esta interacción sin ningún otro elemento (átomo o electrón) que sirva de intermediario. Sin embargo, esto implica que las funciones de onda de los electrones de diferentes átomos se superponen, lo que a menudo no sucede. El intercambio indirecto es cuando la interacción de intercambio entre momentos localizados está mediada por otros átomos o por electrones (Getzlaff, 2007; Blundell, 2001). En el primer caso la interacción se denomina interacción de superintercambio, y ocurre en sólidos iónicos (por ejemplo en MnO) en los cuales la interacción entre iones magnéticos no vecinos está mediada por un ion no magnético que se encuentra en el medio. El segundo caso es particularmente importante ya que ocurre en los metales, donde el intercambio está mediado por electrones de conducción. Este tipo de intercambio se denomina intercambio itinerante o RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida).

Se enfatiza en este punto que la interacción de intercambio es isotrópica, es decir, no hay una orientación preferencial de la magnetización con respecto al eje del cristal. También se debe notar que el valor de las constantes de intercambio J_{ij} de la ec. 2.27 en general van disminuyendo

cuando la distancia entre los espines i y j aumenta, es decir, esta interacción depende de la distancia. Obviamente, la interacción más importante es a primeros vecinos, pero a veces es necesario incluir más vecinos y entonces se pueden ajustar estos valores con una función cuyo valor vaya disminuyendo rápidamente con muy pocas oscilaciones de su signo, de modo que se puede introducir con seguridad un radio de corte R_c (Tranchida et al., 2018). Para el cálculo de la interacción de intercambio con un espín i dado, sólo se debe tener en cuenta los espines j tales que $r_{ij} < R_c$.

De esta manera, el valor de la intensidad de la constante de intercambio se puede aproximar mediante una función isotrópica continua $J(r_{ij})$. Para sistemas 3d, esta función se basa en la curva de Bethe-Slater y está parametrizada mediante tres coeficientes, α en eV, δ en Å y γ , una constante adimensional:

$$J(r_{ij}) = 4\alpha \left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2 \left(1 - \gamma \left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2\right) e^{\left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2} \Theta(R_c - r_{ij}), \quad (2.28)$$

con $\Theta(R_c - r_{ij})$ la función escalonada de Heaviside. Por ejemplo, para el caso del Fe se tiene (Tranchida et al., 2018): $\alpha = 50.996$, $\gamma = 0.281$, y $\delta = 1.999$ para el Hamiltoniano de la ec. 2.27.

Interacción de espín-órbita: anisotropía

La interacción espín-órbita representa la interacción entre el espín \vec{S} y el momento angular orbital \vec{L} de los electrones. Esta interacción es particularmente importante ya que da lugar a una rica variedad de fenómenos como la anisotropía magnetocristalina o la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya. Además, la interacción espín-órbita tiene un origen mecánico-cuántico y sólo puede describirse completamente en el contexto de la

mecánica cuántica relativista. Sin embargo, también en este caso, un enfoque semiclásico puede proporcionar una explicación intuitiva.

Consideremos un electrón orbitando alrededor de un núcleo. En el sistema de referencia del electrón en órbita, el núcleo se mueve alrededor del electrón con una velocidad \vec{v} igual a la velocidad del electrón en el sistema de reposo del núcleo. Así, el núcleo genera un campo magnético $\vec{B} = (\vec{\mathcal{E}} \times \vec{v})/c^2$ (Blundell, 2001). Dado que el campo eléctrico se puede escribir como

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r}, \quad (2.29)$$

y que la energía del momento magnético de espín $\vec{\mu}_S$ en presencia de este campo magnético está dada por $E = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$ (ver ec. 2.7), entonces la energía debida al acoplamiento espín-órbita es

$$E_{S-O} = -\frac{1}{2} \vec{\mu}_S \cdot \vec{B} = \frac{1}{2} \frac{g\mu_B}{r m_e \hbar c^2} \frac{dV(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (2.30)$$

El factor 1/2 es un factor de corrección que viene del cálculo relativista.

Esta interacción espín-órbita es una interacción anisotrópica y da origen a lo que se conoce como anisotropía magneto-cristalina, la cual hace que la magnetización se oriente preferentemente a lo largo de determinadas direcciones de la red, que están relacionadas con la estructura cristalina. Esta interacción está influenciada por el campo cristalino que fija las direcciones del momento angular orbital y, por tanto, determina la dirección de la anisotropía (Bertotti, 1998).

Por ejemplo, si la anisotropía tiene una sola dirección preferida, representada por el vector unitario \hat{e}_K , la energía de anisotropía se puede escribir como

$$E_u = K_u(\vec{S} \cdot \hat{e}_K)^2 . \quad (2.31)$$

Este tipo de anisotropía suele denominarse anisotropía uniaxial. K_u es la constante de anisotropía uniaxial, que representa la barrera de energía que se debe superar para dar vuelta al espín. Otro tipo de anisotropía magneto-cristalina es la anisotropía cúbica que se minimiza cuando la magnetización se encuentra a lo largo de uno de los tres ejes cúbicos principales (ver por ejemplo Bertotti (1998)).

En el caso de un sistema policristalino la dirección de anisotropía de cada grano cristalino se encuentra en diferentes orientaciones, en forma simétrica, por lo tanto su anisotropía magneto-cristalina en promedio sería cero.

Otro ejemplo de anisotropía que se origina en la interacción espín-órbita es la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI). Dzyaloshinskii (Dzyaloshinskii et al., 1957) señaló en primer lugar que la combinación de la interacción espín-órbita y el rompimiento de la simetría de inversión podría dar lugar a una interacción de intercambio antisimétrica con la siguiente energía

$$E_{DMI} = \sum_{ij} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) , \quad (2.32)$$

donde \vec{D}_{ij} representa el vector DMI, cuya intensidad y dirección dependen del acoplamiento de la espín-órbita y de la simetría del cristal. Moriya (1960) mostró cómo calcular este vector \vec{D}_{ij} para momentos localizados. La interacción DMI promueve configuraciones de espines antiparalelos y favorece patrones de magnetización no uniformes.

Interacción de Zeeman

La interacción de Zeeman representa la interacción de un momento magnético con un campo magnético externo. Su energía tiene la forma

$$E_Z = - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_{ext} , \quad (2.33)$$

como ya se introdujo en la ec. (2.7). El nombre se debe al efecto Zeeman, que consiste en la división de las líneas espectrales de un átomo en diferentes componentes en un campo magnético externo. Esta energía se minimiza cuando todos los momentos magnéticos del sistema se alinean con el campo magnético externo y por lo tanto su magnetización es máxima, denominada magnetización de saturación \vec{M}_s .

Considerando la ecuación (2.15), podemos generalizar la energía de Zeeman (2.33) escribiendo

$$E_Z = -g\mu_B \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \cdot \vec{B}_{ext} , \quad (2.34)$$

en el cual se debe recordar que \vec{s}_i es el espín clásico de magnitud 1 y representa el momento angular total de la partícula (esto es, un espín electrónico, un momento angular orbital, o cualquier combinación de ellos), y g es el factor de Landé dado en la ec. 2.16. Para el caso del hierro bcc se tiene $g = 2.2$.

2.3. Dinámica: Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert

La ecuación para el movimiento de rotación de un cuerpo rígido en mecánica clásica es

$$\mathcal{T} = \frac{d\vec{L}}{dt}, \quad (2.35)$$

donde \vec{L} es el momento angular del cuerpo y \mathcal{T} es el torque que actúa sobre él. La ecuación (2.35) sigue siendo válida en mecánica cuántica cuando \vec{L} y \mathcal{T} se reinterpretan como operadores en un espacio de Hilbert, y puede usarse para sistemas de espín reemplazando el operador del momento angular con el operador del momento angular asociado al espín total de un átomo.

Consideremos un sistema con momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$ dados por

$$\vec{\mu}_i = g_i \mu_B \vec{S}_i. \quad (2.36)$$

La ecuación de movimiento ec. (2.9) para este sistema sería

$$\frac{\partial \vec{\mu}_i(t)}{\partial t} = \gamma \vec{\mu}_i(t) \times \vec{B}_i. \quad (2.37)$$

La aplicabilidad de (2.37) no se limita solo al torque ejercido por un campo magnético externo, sino que cualquier torque sobre un momento magnético se puede escribir de la forma (2.37) si definimos un campo magnético “efectivo”

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial E(\{\vec{\mu}_i\})}{\partial \vec{\mu}_i} = -\left(\frac{\partial E}{\partial \mu_{ix}} \hat{i} + \frac{\partial E}{\partial \mu_{iy}} \hat{j} + \frac{\partial E}{\partial \mu_{iz}} \hat{k} \right), \quad (2.38)$$

donde $E(\{\vec{\mu}_i\})$ es la energía del sistema con respecto al trabajo realizado al girar el momento magnético en contra de cualquier fuerza presente (por ejemplo cada una de las interacciones discutidas en la sección 2.2).

Hay que notar que la ec. 2.37 lleva a un movimiento de precesión alrededor de la dirección del campo efectivo. Sin embargo, en sistemas reales los momentos magnéticos llegan al equilibrio cuando se ordenan

colinealmente al campo magnético. Por lo tanto, es necesario introducir un término de amortiguamiento en la dinámica.

La amortiguación (damping) de un sistema físico va acompañada de una desaceleración del movimiento macroscópico y una transferencia de la energía cinética y potencial asociada con el movimiento macroscópico a la energía cinética del movimiento térmico microscópico (Gilbert, 2004), i.e. de la energía térmica. Para un campo de magnetización, esto puede ser mediante la transferencia directa de la energía del movimiento macroscópico a la energía del movimiento térmico microscópico en ondas de espín o mediante la transferencia de la energía macroscópica del campo de magnetización a otros campos a los que está acoplado, por ejemplo, corrientes inducidas (eddy-current) o campos de tensión (strain fields). Esta energía transferida termina como un movimiento térmico microscópico en forma de ondas de espín, vibraciones reticulares (fonones) y excitación térmica de electrones de conducción.

Los detalles de los mecanismos de los procesos de transferencia son demasiado complejos para ser tomados en cuenta explícitamente en las ecuaciones de campo. No obstante, se puede introducir en las ecuaciones de campo un término de amortiguamiento fenomenológico que contenga parámetros que correspondan a la tasa de transferencia de energía y que puedan determinarse experimentalmente sin conocer los detalles de los mecanismos de transferencia.

El caso más simple, que ocurre comúnmente cuando hay muchas fuerzas de amortiguamiento diferentes y no ocurren fenómenos de resonancia, es que la fuerza de amortiguamiento es directamente proporcional a las tasas de cambio de las variables dinámicas macroscópicas del sistema. Para un sistema magnético, las variables dinámicas son los

momentos magnéticos $\vec{\mu}_i(t)$. Una forma común de introducir un término de amortiguamiento de este tipo (en las ecuaciones de movimiento clásicas para un sistema físico) es utilizar una formulación Lagrangiana de las ecuaciones de movimiento y agregar un término dependiente de la velocidad, derivado de una función cuadrática de las derivadas temporales de las variables dinámicas denominadas “función de disipación de Rayleigh” (Goldstein, 1994). Para el sistema de espines, el término agregado en la ecuación de movimiento es $-\eta \partial \vec{\mu}_i(t) / \partial t$, donde η es un parámetro de amortiguamiento característico del material. La ecuación resultante es (Gilbert, 2004):

$$\frac{\partial \vec{\mu}_i(t)}{\partial t} = \gamma \vec{\mu}_i(t) \times \left[\vec{B}_i(t) - \eta \frac{\partial \vec{\mu}_i(t)}{\partial t} \right]. \quad (2.39)$$

La ecuación dinámica amortiguada (2.39) se puede reescribir de una manera más adecuada para cálculos numéricos, multiplicando a ambos lados vectorialmente por $\vec{\mu}_i$:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_i \times \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} &= \gamma \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i) - \gamma \eta \vec{\mu}_i \times \left(\vec{\mu}_i \times \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} \right) \\ &= \gamma \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i) - \gamma \eta \vec{\mu}_i \left(\vec{\mu}_i \cdot \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} \right) + \gamma \eta \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_i). \end{aligned}$$

Pero $\vec{\mu}_i \cdot \partial \vec{\mu}_i / \partial t = 0$, como se puede deducir desde la ec. (2.39), entonces

$$\vec{\mu}_i \times \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} = \gamma \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i) + \gamma \eta \mu_i^2 \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t}.$$

Reemplazando esta última expresión en la ec. (2.39) se obtiene

$$\frac{\partial \vec{\mu}_i(t)}{\partial t} = \gamma \vec{\mu}_i \times \vec{B}_i - \gamma \eta \left[\gamma \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i) + \gamma \eta \mu_i^2 \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial t} \right],$$

o sea,

$$\frac{\partial \vec{\mu}_i(t)}{\partial t} = \frac{\gamma}{1 + \gamma^2 \eta^2 \mu_i^2} \vec{\mu}_i \times \vec{B}_i - \frac{\gamma^2 \eta}{1 + \gamma^2 \eta^2 \mu_i^2} \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i). \quad (2.40)$$

Notemos que $\vec{\mu}_i \cdot \partial \vec{\mu}_i / \partial t = 0 \Rightarrow \partial \mu_i^2 / \partial t = 0$, que significa que la magnitud de los momentos magnéticos es constante en el tiempo.

Tomando en cuenta la ec. (2.36), y definiendo la constante de amortiguamiento transversal $\lambda_i = \gamma \eta |\vec{\mu}_i| = \gamma \eta g_i \mu_B$, la ec. (2.40) se puede escribir de la forma que llamaremos la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (Tranchida et al., 2018):

$$\frac{\partial \vec{s}_i(t)}{\partial t} = \frac{1}{1 + \lambda_i^2} (\vec{\omega}_i - \lambda_i \vec{\omega}_i \times \vec{s}_i) \times \vec{s}_i, \quad (2.41)$$

con $\vec{\omega}_i$ el análogo a la fuerza de espín aplicado al i -ésimo espín y dado por (ver ec. 2.38):

$$\vec{\omega}_i = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{s}_i}. \quad (2.42)$$

En efecto, de acuerdo a las definiciones de μ_B , λ y la ec. 2.36, se cumplen las relaciones $\hbar \gamma = -g_i \mu_B$, y

$$\gamma \vec{B}_i = \gamma \left(-\frac{\partial E}{\partial \vec{\mu}_i} \right) = -\frac{g_i \mu_B}{\hbar} \frac{\partial E}{g_i \mu_B \partial \vec{s}_i} = -\vec{\omega}_i.$$

Subrayemos que en la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (2.41) el vector

de espín \vec{s} es un vector unitario que da la dirección del momento magnético atómico.

En sistemas de redes de espín que se encuentran a cierta temperatura T , se debe introducir un termostato para controlar el flujo de producción de entropía entre el sistema y un depósito térmico (Rapaport, 2004). En dinámica molecular se han explorado muchos enfoques, y uno de los más utilizados es el propuesto por Langevin (Feller et al., 1995).

En el enfoque de Langevin, el sistema de espines está conectado a un baño térmico modelado por un número infinito de grados de libertad. Las propiedades de dicho baño están dadas por $\vec{\Gamma}$, un vector aleatorio, cuyos componentes siguen una ley de probabilidad Gaussiana dada por el primer y segundo momento:

$$\begin{aligned}\langle \vec{\Gamma}(t) \rangle &= \vec{0}, \\ \langle \Gamma_\alpha(t) \Gamma_\beta(t') \rangle &= 2D_s \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'),\end{aligned}\tag{2.43}$$

donde α y β son las componentes del vector. Para preservar la norma de cada espín individual, esta fluctuación aleatoria se agrega de manera multiplicativa a la ecuación (2.41) a través de un torque aleatorio (Mayergoyz et al., 2009), que conduce a la siguiente ecuación estocástica de LLG:

$$\frac{\partial \vec{s}_i(t)}{\partial t} = \frac{1}{1 + \lambda_i^2} \left[\left(\vec{\omega}_i + \vec{\Gamma} \right) - \lambda_i (\vec{\omega}_i \times \vec{s}_i) \right] \times \vec{s}_i.\tag{2.44}$$

A partir de la ecuación (2.44), se puede derivar una ecuación de Fokker-Planck (García-Palacios and Lázaro, 1998), cuya resolución permite derivar una relación de fluctuación-disipación que asigna una proporción de la amplitud del ruido D_{si} para cada momento magnético al termostato externo dado T (Mayergoyz et al., 2009):

$$D_{si} = \frac{2\pi\lambda_i k_B T}{\hbar} . \quad (2.45)$$

Este termostato de Langevin debe estar relacionado con una cantidad microcanónica definida en un conjunto estadístico que mida la temperatura. En el caso de un sistema de partículas, la temperatura en equilibrio se calcula a partir de su energía cinética media; sin embargo, no es obvio cuál es la energía cinética transitoria de un sistema de espines. Nurdin and Schotte (2000) basándose en un enfoque geométrico propuesto por Rugh (Rugh, 1998) para los sistemas de espín, y considerando el límite termodinámico, encontraron una temperatura de espín dada por

$$T_S = \frac{\hbar}{3Nk_B} \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{s}_i \times \vec{\omega}_i|^2}{\sum_{i=1}^N \vec{s}_i \cdot \vec{\omega}_i} . \quad (2.46)$$

Una definición similar para la temperatura T_S de un conjunto de espines fue también dada por Ma et al. (2010), basándose en el teorema de fluctuación-disipación. Además, se ha demostrado (Perera et al., 2016) que la definición dada por la ecuación (2.46) es eficiente para la termalización del subsistema de espín y su relajación hacia el equilibrio térmico durante simulaciones de redes de espín.

2.4. Dominios Magnéticos y Paredes de Dominio

La interacción de intercambio puede dar lugar a la presencia de una magnetización espontánea en ferromagnetos a temperaturas por debajo de la temperatura de Curie. Sin embargo, se observa que muestras ferromagnéticas típicas a menudo no presentan una magnetización neta. Esto es debido a

que se dividen en zonas, llamadas dominios magnéticos (como se muestra en la fig. 1.1), con diferente magnetización uniforme, de manera que la magnetización neta total es cero. Este comportamiento no puede explicarse en términos de interacción de intercambio, lo que favorecería una magnetización uniforme. En realidad, la interacción dipolar es responsable de esta formación de dominios, como se muestra en la Fig. 2.1

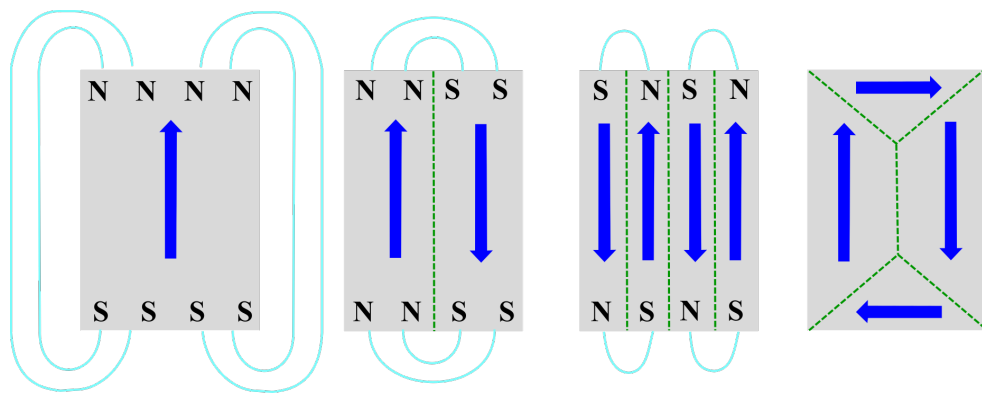


Figura 2.1. Formación de dominios magnéticos debido a la reducción de la energía magnetostática.

Como se ve en la Fig. 2.1, un material magnético de un solo dominio creará un gran campo magnético que se extiende hacia afuera del material. Esto requiere mucha energía magnetostática almacenada en el campo. Para reducir esta energía, el material se divide en dos dominios con la magnetización en direcciones opuestas; las líneas de campo pasan en direcciones opuestas a través de cada dominio, reduciendo el campo fuera del material. Para reducir aún más la energía, cada uno de estos dominios puede seguir dividiéndose, con magnetización en direcciones alternas y por tanto con cantidades aún más pequeñas de campo fuera del material. La formación adicional de dominios magnéticos cesará cuando la energía para la formación de la pared del dominio adicional sea mayor que la reducción de la energía magnetostática. En esta etapa, cada dominio está magnetizado

hasta la saturación en la dirección de uno de los ejes fáciles del material, pero la magnetización neta es cero.

Si el cambio de la magnetización de un dominio a otro es abrupta (como se muestra en la Fig. 2.2a) el costo de la energía de intercambio sería muy alto. Por esta razón se crean regiones, en la interfaz de dos dominios magnéticos, en el cual la magnetización cambia lentamente desde una dirección a otra, estas regiones se conocen como paredes de dominio (DW), como se observa en la Fig. 2.2b.

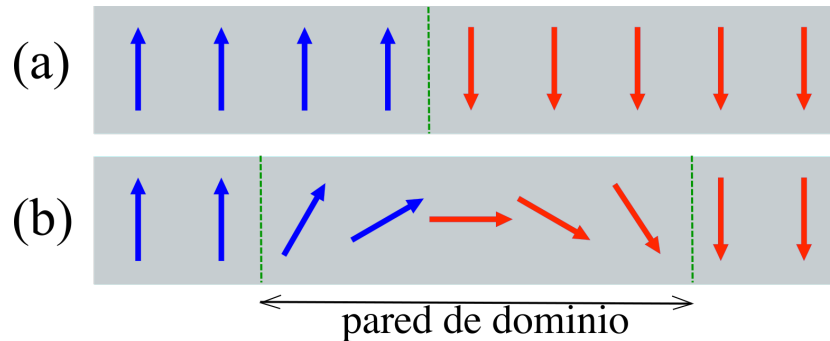


Figura 2.2. (a) cambio abrupto de la dirección de magnetización que tiene una alta energía. (b) Pared de dominio magnético que reduce la energía de intercambio

Tradicionalmente, las DWs se han clasificado en dos tipos: una de ellas es la pared de Bloch, en la que los espines giran normal al plano de la pared. Otra es la pared de Néel, en la cual los espines giran dentro del plano de la pared (Kittel, 2004), como se muestra en la Fig. 2.3.

Sin embargo, su forma y su respuesta dinámica depende de factores externos como campos magnéticos aplicados, corrientes eléctricas y en gran medida de la estructura del material. Por ejemplo, en nanoalambres de permalloy se han identificado tres estructuras de pared de dominio distintas (Hayashi et al., 2008) como tipos transversales, de vórtice y antivórtice, como se muestra en la Fig. 2.4. Las estructuras de pared transversales y de vórtice se clasifican además según sus quiralidades (el sentido de rotación del espín

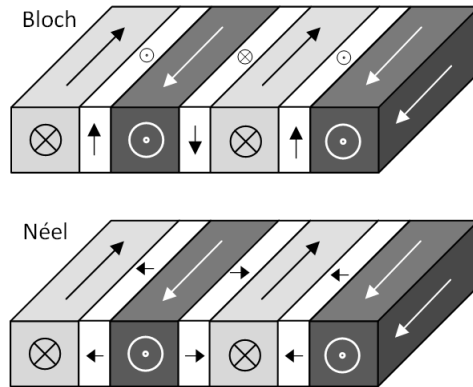


Figura 2.3. Paredes de dominio de Bloch y de Néel. Figura tomada de Wikipedia® (2008).

de izquierda a derecha) en sentido horario y antihorario (con esta definición, las quiralidades de las paredes del dominio transversal y del vórtice que se muestran en la Fig. 2.4 son ambas en sentido antihorario).



Figura 2.4. Paredes de dominio antivórtice, transversal y de vórtice. Figura modificada de Hayashi et al. (2008).

Capítulo 3

SIMULACIONES NUMÉRICAS

En este capítulo, los distintos enfoques numéricos se presentan como herramientas complementarias, cada una con ventajas y limitaciones propias, y no como una secuencia de métodos en la que uno reemplaza al anterior. La articulación entre estos enfoques se desarrolla en los capítulos posteriores, donde se emplean de manera conjunta para analizar los fenómenos físicos de interés

3.1. Dinámica de espines

La ecuación estocástica de LLG, (2.44), en realidad se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas que describen la evolución temporal de los espines que deben ser considerados discretamente y ubicados en diferentes sitios reticulares y en contacto con un termostato. Para un sistema de $N > 2$ espines, no existen soluciones analíticas generales cuando se consideran múltiples espines interactuantes con interacciones realistas, como las discutidas en la sección 2.2. Entonces, para poder estudiar la evolución temporal de estos N espines, se debe implementar un programa numérico que resuelva esta evolución.

Para esto se implementó un algoritmo numérico basado en esquemas

de integración temporal ampliamente utilizados en dinámica molecular, diseñados para describir la evolución temporal de sistemas con un gran número de grados de libertad acoplados. En dinámica molecular, estos algoritmos permiten determinar la evolución temporal de N partículas resolviendo las ecuaciones de Newton Rapaport (2004). En el presente trabajo, dichos esquemas se adaptan para integrar la ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert, que describe la dinámica de N espines interactuantes. Esta elección se justifica por la analogía formal entre la dinámica de partículas clásicas y la dinámica de espines atomísticos, ambas gobernadas por sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas. El diagrama de flujo del algoritmo utilizado para resolver las ecuaciones LLG se muestra en la Fig. 3.1.

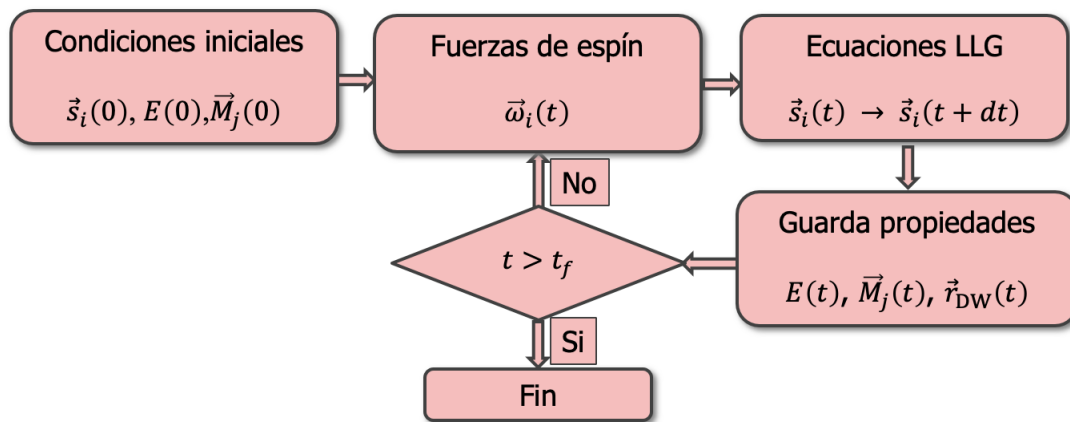


Figura 3.1. Diagrama de flujo del algoritmo que resuelve la dinámica de espines. Cada bloque representa una etapa del procedimiento numérico, cuyas variables y operaciones se detallan en el texto.

El diagrama de flujo mostrado en la Fig. 3.1 resume de manera esquemática el procedimiento numérico utilizado para implementar la dinámica de espines. Cada uno de los bloques representados en el diagrama se desarrolla en detalle a continuación, donde se describen las condiciones

iniciales del sistema, el cálculo de los campos efectivos y torques, la integración numérica de las ecuaciones de Landau–Lifshitz–Gilbert, la implementación del termostato y el almacenamiento de las magnitudes físicas relevantes. Para ejemplificar el diagrama, el sistema considerado es un nanoalambre ferromagnético policristalino colocado en un campo magnético externo constante, dirigido a lo largo del eje del alambre; no obstante, el algoritmo se puede aplicar en forma general a otros tipos de campos y/o de estructuras.

Los vectores de espín clásico \vec{s}_i son asociados con cada sitio de la red cristalina que representa el sistema, en nuestro caso nanoalambres, etiquetados por $i \in 1 \dots N$. Los vectores de espín son considerados como vectores unitarios.

Inicialmente, al tiempo $t = 0$, se colocan todos los espines en la dirección opuesta del campo magnético, de modo que se genere una DW que se debe propagar en el sentido del campo. Se calcula, dentro de estas condiciones iniciales, la energía magnética total E del sistema como la suma de las siguientes contribuciones: la energía de intercambio (ec. 2.27), la energía dipolar (ec. 2.13) que considera la interacción de cada espín con todos los demás espines del sistema, y la energía de Zeeman (ec. 2.34) debido al campo magnético externo. No se incluye la energía magnetocristalina, ya que al tratarse de nanoalambres policristalinos, el valor efectivo de la constante de anisotropía se aproxima a cero. La interacción de intercambio se considera únicamente hasta los primeros vecinos, lo cual es suficiente para capturar la física dominante del sistema.

También se calcula la magnetización de cada capa, \vec{M}_j , perpendicular al eje del nanoalambre:

$$\vec{M}_j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \vec{s}_i, \quad (3.1)$$

donde N_j es el número de espines en la j -ésima capa y la suma es sobre los espines que pertenecen a esta capa. Además, se calculan los torques $\vec{\omega}_i$ sobre cada espín dados por la ec. (2.42).

En este esquema, los torques $\vec{\omega}_i$ calculados a partir de las interacciones magnéticas del sistema no son solo magnitudes físicas de interés, sino que constituyen la entrada directa al operador de propagación numérica. Es decir, el propagador de Omelyan se utiliza para actualizar los vectores de espín \vec{s}_i en cada paso temporal Δt , integrando de manera precisa las ecuaciones LLG (ec. 2.44). De esta forma, la evolución temporal de los espines, la dinámica de la pared de dominio, la magnetización de cada capa y la energía total del sistema quedan directamente vinculadas con el procedimiento de integración implementado, cerrando el ciclo entre la descripción física, la formulación matemática y la implementación computacional. Este enfoque asegura que las magnitudes físicas relevantes se calculen de manera consistente a lo largo de toda la simulación.

Una vez que se calcula $\vec{\omega}_i$ como un funcional de los vectores de espín, la dinámica temporal del conjunto de espines en una red fija se puede simular integrando el conjunto de ecuaciones acoplados (2.44) de LLG. Estas ecuaciones muestran un modelo de precesión que preserva la norma de cada espín individual a lo largo del tiempo. En consecuencia, su correspondiente operador numérico de evolución temporal también debe preservar esta propiedad con una precisión determinada. Por consideraciones geométricas, Omelyan et al. (2001) derivaron la siguiente expresión para los operadores de propagación de un solo espín:

$$\begin{aligned} \vec{s}_i(t + \Delta t) &= \\ &= \frac{\vec{s}_i(t) + \vec{\omega}_i(t) \times \vec{s}_i(t)\Delta t + [\vec{\omega}_i(t) (\vec{\omega}_i(t) \cdot \vec{s}_i(t)) - |\vec{\omega}_i(t)|^2 \vec{s}_i(t)] \Delta t^2/4}{1 + |\vec{\omega}_i(t)|^2 \Delta t^2/4}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

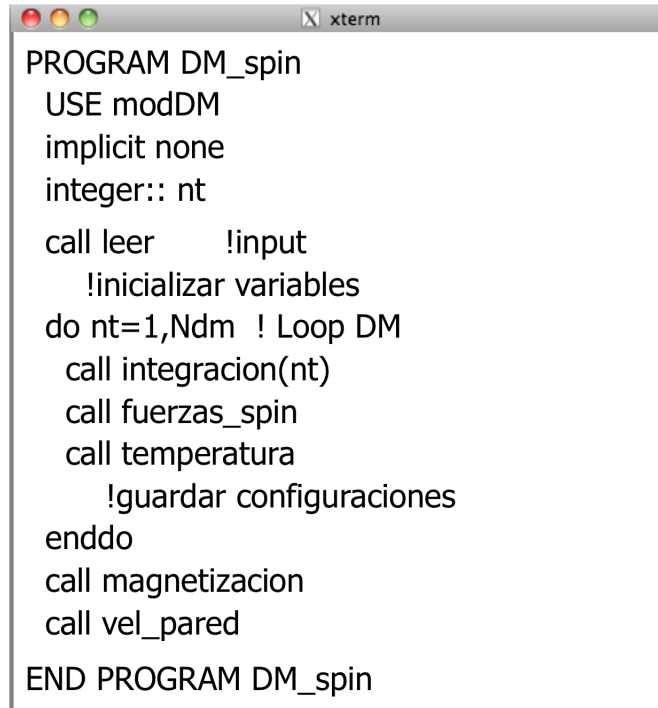
Esta expresión utiliza aproximaciones de bajo orden para funciones trigonométricas que satisfacen exactamente $\cos^2(|\vec{\omega}_i|t) + \sin^2(|\vec{\omega}_i|t) = 1$, a diferencia de las aproximaciones de Padé habituales (Baker Jr, 1996). Como resultado, el propagador de un solo espín conserva la misma precisión $O(\Delta t^3)$ que el resto del esquema de discretización. Además, el número de operaciones numéricas necesarias para evaluar este incremento de tiempo es menor que las llamadas correspondientes a las funciones trigonométricas, lo que acelera significativamente el procedimiento y elimina la necesidad de un reescalamiento normativo que normalmente rompe el carácter simpléctico y las propiedades de inversión del tiempo (Dullweber et al., 1997).

Para mantener las simulaciones en un ensamble canónico, se implementó el termostato de Langevin (ecs. 2.43 y 2.45). Estas expresiones son calculadas, en cada instante de tiempo, inmediatamente después de integrar las ecuaciones y actualizar los torques $\omega_i(t)$.

Después de la integración de las ecuaciones de LLG, se guardan las propiedades físicas relevantes para el estudio del sistema como son: la energía, la magnetización de cada capa (que se necesita para definir la posición de la pared de dominio) y la posición de la pared de dominio $\vec{r}_{DW}(t)$, y la temperatura del sistema de espines en cada instante de tiempo.

Este algoritmo fue implementado en el lenguaje FORTRAN siguiendo el siguiente esquema:

La implementación en FORTRAN presentada en la Figura 3.2



```

PROGRAM DM_spin
  USE modDM
  implicit none
  integer:: nt
  call leer      !input
               !inicializar variables
  do nt=1,Ndm ! Loop DM
    call integracion(nt)
    call fuerzas_spin
    call temperatura
               !guardar configuraciones
  enddo
  call magnetizacion
  call vel_pared
END PROGRAM DM_spin
    
```

Figura 3.2. Esquema de la implementación de la dinámica de espines, usando el lenguaje FORTRAN. Se muestra la organización modular del código y su correspondencia con las etapas del diagrama de flujo general (Fig. 3.1). Se indican las principales subrutinas encargadas de cada paso del algoritmo.

corresponde directamente al diagrama de flujo general del algoritmo mostrado previamente en la Figura 3.1. Cada bloque del diagrama conceptual se traduce en una o varias subrutinas específicas dentro del código, asegurando que el flujo lógico del programa reproduzca fielmente el procedimiento numérico para simular la dinámica de espines. Esto permite un control detallado de cada etapa: desde la inicialización de las variables y condiciones iniciales, pasando por el cálculo de torques y energías, la integración temporal mediante las ecuaciones LLG, hasta el registro y análisis de las magnitudes físicas relevantes para el estudio.

En el archivo modDM.f90 se encuentran definidas todas las variables que representan las magnitudes físicas del problema, como los vectores

de posición y de espín, la temperatura, el campo magnético, etc. En el archivo leer.f90, además de definir ciertas variables y poner la configuración magnética inicial, se lee un archivo llamado input.dat que define las magnitudes relevantes del sistema (ver el anexo A.1).

Después de calcular las magnitudes iniciales (en la sección “inicializar variables” del programa DM_spin), se inicia el ciclo de pasos en el que se avanza el tiempo en intervalos Δt hasta que se haya invertido todos los espines. En este ciclo, en la subrutina integracion.f90 está codificada la integración de las ecuaciones de LLG usando la ec. 3.2, en la cual está incluido el acoplamiento con el baño térmico. En la subrutina fuerzas_spin.f90 está implementado el cálculo de los $\vec{\omega}_i$ y de la energía total usando las diferentes interacciones mencionadas anteriormente. En la subrutina temperatura.f90 se calcula la temperatura de los espines dada por la ec. 2.46, después de la cual se guardan algunas configuraciones de espín (en la sección “guardar configuraciones” del programa DM_spin) para posteriormente analizarlas.

Finalmente, en la subrutina magnetizacion.f90 se implementó el cálculo de la magnetización total del sistema y su proyección sobre la dirección del campo magnético, y en vel_pared.f90 se calcula la magnetización de cada plano del sistema, que es de suma importancia para definir la posición de la DW, como se verá más adelante.

3.2. La teoría del escalamiento

Es importante percatarse de las restricciones impuestas en las simulaciones de la dinámica de espines, descrita en la sección anterior, respecto al número de sitios involucrados en los cálculos. Considerando un

nanoalambre ferromagnético policristalino, como en la sección anterior, con estructura bcc y parámetro de red $a = 2.86 \text{ \AA}$, un ejemplar de 60 nm de diámetro y 1000 nm de longitud contiene aproximadamente $N = 2.4 \times 10^8$ espines discretos. Esta enorme cantidad de espines hace que la simulación directa sea inviable con recursos computacionales estándar, principalmente debido al cálculo de la energía dipolar, que involucra interacciones de largo alcance entre todos los pares de espines. De manera más precisa, el tiempo de cómputo para la energía dipolar escala como N^2 . Por ejemplo, tomando como referencia un cálculo de la energía dipolar en un sistema de 1040 espines, que demora 5.3×10^{-2} s en nuestros servidores, el tiempo estimado para un sistema real como el considerado sería del orden de 91 años por cada paso temporal. Esta estimación asume un cálculo directo sin técnicas de aceleración numérica, subrayando así la necesidad de métodos eficientes como el enfoque de escalamiento que se explica en esta sección.

Para evitar esta dificultad, realizamos las simulaciones de la dinámica de espines dentro del marco de la técnica de escalamiento. El objetivo fundamental de esta técnica no es únicamente reducir el número de espines del sistema, sino preservar la competencia relativa entre la energía de intercambio y la energía dipolar, que es la que gobierna tanto los estados magnéticos como la dinámica de las paredes de dominio. En este sentido, el escalamiento se define de manera tal que dicha relación energética permanezca invariante al reducir el tamaño del sistema y, posteriormente, al reescalar los resultados a las dimensiones reales.

La propuesta original de d'Albuquerque e Castro et al. (2002) fue escalar la constante de intercambio J por un factor $x < 1$:

$$J' = xJ, \quad (3.3)$$

este escalamiento se realiza para disminuir la intensidad de la energía de intercambio, de manera de mantener la misma competencia con la energía dipolar en un sistema escalado, con dimensiones que deben ser escaladas de la siguiente manera:

$$D' = x^\eta D; \quad L' = x^\eta L, \quad (3.4)$$

donde D y L son el diámetro y la longitud del nanoalambre y D' , L' sus respectivas cantidades escaladas. El exponente de escalamiento η es un parámetro que ayuda a obtener los mismos resultados al re-escalar el sistema a sus dimensiones reales usando diferentes valores de escalamiento x . En este contexto, el exponente de escalamiento no debe interpretarse como un exponente crítico universal, sino como un exponente efectivo que relaciona la reducción geométrica del sistema con la renormalización de las energías involucradas en el proceso de escalamiento. Su valor se determina imponiendo la condición de invariancia de las propiedades físicas relevantes al reescalar los resultados a las dimensiones reales del sistema, lo que se manifiesta en el colapso de los diagramas de fase y otras magnitudes físicas obtenidas para distintos valores del factor de escalamiento.

Este re-escalamiento de las dimensiones del sistema y su independencia respecto a los valores del factor de escalamiento x constituyen la evidencia central que valida la técnica de escalamiento utilizada. En la Fig. 3.3 se presenta un ejemplo de este comportamiento, en el que se grafica el punto de transición entre los estados magnéticos (ferromagnéticos paralelo y perpendicular al eje del alambre, y el estado vórtice) para nanoalambres de longitud L y diámetro D . Estos puntos de transición se obtienen encontrando las longitudes y diámetros para los cuales las energías (consideradas en pares) son iguales, realizando los cálculos en sistemas escalados de longitud

L' y diámetro D' (mostrados en el inserto del gráfico) para diferentes factores de escalamiento $\frac{L'_t}{L_t}$ indicados en la leyenda. La superposición o colapso de las curvas para distintos valores de escalamiento indica que, al aplicar el método, las propiedades físicas relevantes del sistema se mantienen invariantes. Esto implica que los resultados obtenidos con sistemas de tamaño reducido pueden ser re-escalados confiablemente a las dimensiones reales del sistema, permitiendo así superar las limitaciones computacionales sin perder fidelidad física.

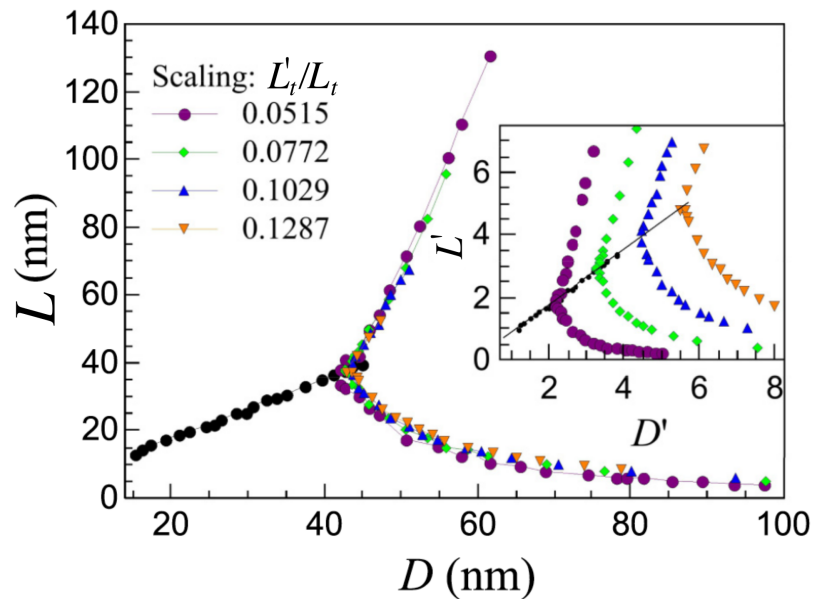


Figura 3.3. Diagrama de fase colapsado para diferentes valores del escalamiento. El recuadro muestra el diagrama de fases obtenido para diferentes valores del escalamiento. Imagen modificada desde Velásquez et al. (2015)

El valor del exponente de escala η ha sido fuente de debate, en efecto, se han utilizado diferentes valores como $\eta = 0.55$ (d'Albuquerque e Castro et al., 2002) en estudios estáticos de sistemas discretos, $\eta = 0.57$ (Mejía-López et al., 2005) en estudios dinámicos de sistemas discretos y $\eta = 0.50$ (Zhang et al., 2008) para modelos continuos. Esta aparente arbitrariedad en el

valor del exponente de escalamiento fue resuelta por Velásquez et al. (2015), teoría que se resume a continuación.

Como se observa en la ec. (3.3), en la original técnica de escalamiento se escala linealmente la constante de intercambio. Sin embargo, no hay una razón fundamental para pensar que este esquema de escala deba aplicarse particularmente a J . En cambio, en una concepción más fundamental, se puede considerar un escalamiento lineal de la energía de intercambio (no solo de J), a través de un parámetro λ , es decir

$$E'_{tot} = \lambda E'_{ex} + E'_{dip} , \quad (3.5)$$

donde el símbolo ' significa que las cantidades correspondientes están escaladas. Aquí, λ representa varios efectos diferentes que se producen cada vez que se escala las dimensiones del sistema; estos efectos incluyen cambios en el número de partículas, i.e., en los límites de las sumas de la ecuación (2.27), cambios en los valores de espín de los átomos de los sistemas y/o cambios en la intensidad de la interacción entre átomos. Este aspecto representa una diferencia conceptual notable con respecto al esquema de escalamiento original donde un cambio está implicado únicamente en el valor interacción J durante el proceso de reducción de escala. El factor de escalamiento λ puede igualmente ser aplicado al término de energía dipolar en lugar del término de energía de intercambio (Velásquez et al., 2015; Radhakrishnan et al., 2017).

El método inicia demostrando que la línea de transición que separa los estados FM orientados perpendicularmente de aquellos orientados paralelamente al eje del alambre es independiente de λ , ya que ésta se elimina al igualar la energía de estas dos configuraciones. Mientras que su pendiente depende sólo de la estructura cristalina del material. Por lo tanto, el punto

triple que separa los estados FM del estado vórtice se debe mover a lo largo de esta línea cuando los sistemas son escalados. Se puede demostrar (Velásquez et al., 2015) que se obtiene el mismo diagrama de fases real (re-escalando los sistemas) si la geometría se escala mediante las relaciones:

$$D' = \gamma D; \quad L' = \gamma L, \quad (3.6)$$

con

$$\gamma \equiv \left(\frac{L'_t}{L_t} \right) = \left(\frac{D'_t}{D_t} \right),$$

donde (D'_t, L'_t) y (D_t, L_t) representan la localización del punto triple de los sistemas escalados y del sistema real, respectivamente. O sea, al final se demuestra que el factor x^η del escalamiento original dado por la ecuación (3.4) es $x^\eta = L'_t/L_t = D'_t/D_t$, y que $\lambda = \gamma^\delta$ con $\delta \equiv \beta/\eta$ una constante que depende solo del tipo de material. En el caso de sistemas basados en Fe, $\delta = 1.80$.

Por lo tanto, el factor de escala x^η , tal como se emplea en la formulación original del enfoque de escala, representa la relación entre las longitudes (o entre los diámetros) del punto triple de un sistema escalado seleccionado y el sistema verdadero y, en consecuencia, ambos parámetros x y η son solamente artificios matemáticos en la metodología tal como se presenta en su forma original. Es decir, dentro de esta formulación de escalamiento más general, se puede elegir cualquier valor de η con tal que la razón $\delta = \beta/\eta$ permanezca constante.

Para resumir, desde un punto de vista práctico, el proceso de escalamiento consiste en:

- (i) Determinar numéricamente muestras (D, L) para dibujar la línea de

transición entre estados FM paralelo y perpendicular al eje del sistema. Considerar estas muestras como puntos triples de los sistemas escalados.

- (ii) Obtener numéricamente y para un número pequeño (4 o 5) de muestras muy pequeñas, el conjunto de valores (L', λ) . Esto se realiza igualando la energía del estado del vórtice con las energías de las configuraciones FM, variando λ . Con esto se obtiene un gráfico λ vs L .
- (iii) Obtener el ajuste lineal para el diagrama $\log \lambda - \log L'$:

$$\log \lambda = \delta \log L'_t - \delta \log L_t . \quad (3.7)$$

Con esto se encuentran el exponente de escalamiento δ y el valor de la longitud real L_t del punto triple del material bajo estudio.

- (iv) Finalmente, se puede elegir un valor del factor de escalamiento γ para un tamaño particular del sistema desde las ec. (3.6) (que es equivalente a decir que se elige un L'_t arbitrario) y el correspondiente escalamiento λ para la energía de intercambio que es parte del Hamiltoniano del sistema (ver ec. (3.5)) estaría dado por $\lambda = \gamma^\delta$.

3.3. Teoría Micromagnética

Como se detalló en la secciones 3.1 y 3.2, una manera de resolver un sistema magnético nanoestructurado es considerando los espines en una red cristalina discreta y usar la técnica de escalamiento para tratar el gran número de espines. Sin embargo, existe otro enfoque, introducida por W.F. Brown (Brown, 1963) , que es considerar el sistema en una aproximación al continuo y dividir el espacio en regiones grandes (celdas) en donde la

dirección de los espines se puede considerar aproximadamente dirigidos en la misma dirección. Este enfoque se conoce como micromagnetismo.

El enfoque micromagnético no se introduce como un reemplazo del modelo discreto escalado, sino como una herramienta complementaria que permite describir la magnetización de manera continua y eficiente a escalas mesoscópicas. Su principal utilidad dentro de este trabajo es proporcionar un marco de referencia para validar los resultados obtenidos con modelos discretos escalados, comparando características dinámicas bien conocidas, como la velocidad de propagación de paredes de dominio, y asegurando la consistencia de las simulaciones de dinámica de espines con la física esperada a escalas mayores.

El enfoque más eficiente para describir la magnetización a escalas micromagnéticas es considerar la magnetización como una función continua del espacio $\vec{M}(\vec{r})$. La magnetización en cada punto representa un promedio sobre un cierto volumen elemental ΔV , el cual debe ser lo suficientemente pequeño como para que la magnetización pueda considerarse uniforme dentro de ΔV , y debe ser lo suficientemente grande para que contenga un número significativo de momentos magnéticos elementales.

Este enfoque implica también una suposición sobre las escalas de tiempo: se supone que la escala de tiempo en la que los momentos magnéticos dentro del volumen ΔV alcanzan su valor de equilibrio termodinámico \vec{M} , con respecto a un valor local dado $\vec{M}(\vec{r})$, es mucho más corto que la escala de tiempo en la que el sistema en su conjunto alcanza su configuración de equilibrio $\vec{M}(\vec{r})$. En otras palabras, la dinámica de los momentos elementales dentro de cada celda es mucho más rápida que la dinámica de la magnetización promedio.

Dentro de este enfoque, la energía interna E del sistema es un funcional

de la magnetización $E[\vec{M}(\vec{r})]$ (en lugar de ser función de los momentos magnéticos individuales). El estado fundamental del sistema es un mínimo de energía y tiene que satisfacer $\delta E[\delta \vec{M}(\vec{r})] = 0$. Por lo tanto, para poder utilizar esta aproximación al continuo, es importante escribir las diferentes contribuciones a la energía del sistema acorde a este modelo, es decir, cada contribución descrita en la sección 2.2 debe ser puesta como funcionales de la magnetización.

El hecho de que la energía de intercambio favorece alineaciones colineales de los momentos magnéticos, conduce a la existencia de una magnetización espontánea $\vec{M}_s(T)$ en sistemas FM. A temperaturas bajas con respecto a la temperatura de Curie, $M_s(T)$ prácticamente no depende del campo externo sino únicamente de la dinámica de los momentos magnéticos elementales dentro de la celda elemental. Esta dinámica, dominada por la interacción de intercambio entre los momentos magnéticos, es mucho más rápida que la dinámica del $\vec{M}(\vec{r})$ promedio. Como consecuencia, el módulo de magnetización en cada celda alcanza su valor de equilibrio mucho más rápido que el tiempo necesario para que la magnetización general alcance su configuración final. Entonces, el principal efecto de la interacción de intercambio es que en cada celda elemental se puede escribir:

$$\vec{M}(\vec{r}) = M_s \vec{m}(\vec{r}) , \quad (3.8)$$

donde $\vec{m}(\vec{r})$ es un vector unitario y M_s es la magnetización de saturación del material, que se considera constante a una temperatura determinada.

Por otro lado, como el efecto de la interacción de intercambio es local, la magnetización de celdas elementales contiguas no necesariamente están alineadas. Si esta desalineación es pequeña, la Ec. (2.27) se puede reescribir como

$$E_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S^2 \cos(\theta_{ij}) \quad (3.9)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S^2 \left(1 - \frac{\theta_{ij}^2}{2} + O(\theta_{ij}^2) \right), \quad (3.10)$$

donde θ_{ij} indica el ángulo entre los espines i -ésimo y j -ésimo. Recordando que $\vec{m}(\vec{r})$ es un vector unitario se puede demostrar que $\theta_{ij} = |\vec{m}_i - \vec{m}_j| \approx (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla})\vec{m}$, con \vec{r}_{ij} el vector relativo entre los espines i y j . Entonces, la ecuación (3.10) se reduce a

$$E_{ex} = const - \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{J_{ij} S^2}{2} \left[(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla})\vec{m} \right]^2. \quad (3.11)$$

Por lo tanto, para cualquier red cristalina, la energía de intercambio para el volumen elemental ΔV se reduce a

$$\Delta E_{ex} = A \left[(\vec{\nabla} m_x)^2 + (\vec{\nabla} m_y)^2 + (\vec{\nabla} m_z)^2 \right] \Delta V, \quad (3.12)$$

donde $A = 2kJS^2/a$ es el coeficiente de rigidez de intercambio (exchange stiffness) que tiene unidades de J/m, a es la constante de red y k depende del tipo de red ($k = 1$ para la cúbica simple, $k = 2$ para la BCC y $k = 4$ para la FCC).

En micromagnetismo, la energía de anisotropía se describe fenomenológicamente como una función de la dirección de magnetización y la dirección del eje fácil (o ejes fáciles). Para el caso de una anisotropía uniaxial en la dirección \vec{u} , la energía en la celda elemental se escribe

$$\Delta E_{anis} = -K_u (\vec{m} \cdot \vec{u})^2 \Delta V. \quad (3.13)$$

La energía Zeeman que representa la contribución energética debida a la interacción de la magnetización con el campo magnético externo \vec{H} se describe con la expresión

$$\Delta E_Z = -\mu_0 M_s \left(\vec{m} \cdot \vec{H} \right) \Delta V . \quad (3.14)$$

Finalmente, la energía dipolar desde un punto de vista de un modelo continuo se puede pensar como la energía de los momentos magnéticos en el campo magnético generados por ellos mismos, que se le denomina energía magnetostática, la cual para la celda elemental es (Aharoni, 2000; Bertotti, 1998)

$$\Delta E_M = -\frac{\mu_0}{2} M_s \left[\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_M(\vec{r}) \right] \Delta V , \quad (3.15)$$

donde el campo magnetostático \vec{H}_M se calcula usando las ecuaciones de Maxwell, que dan como solución:

$$\vec{H}_M = -\nabla \phi , \quad (3.16)$$

con

$$\phi(\vec{r}) = -\frac{M_s}{4\pi} \int \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{m}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' , \quad (3.17)$$

donde la integral es sobre todo el espacio. La energía magnetostática da lugar a una anisotropía de forma, es decir, la magnetización se alinea preferiblemente a lo largo de ciertas direcciones que dependen de la forma de la muestra. Más específicamente, la magnetización se alineará preferiblemente en direcciones que generen menos cargas magnéticas y minimicen la energía magnetostática. Estas direcciones, a su vez, dependen

de la geometría de la muestra. Generalmente se intenta evitar que quede perpendicular a las superficies del objeto magnético ya que generaría cargas magnéticas superficiales.

La energía total del sistema viene dada por la suma de los diferentes términos de energía en cada volumen elemental ΔV . Al transformar la suma en una integral sobre todo el objeto magnético, la energía total se escribe como

$$E = \int_V \left\{ A \left[(\vec{\nabla} m_x)^2 + (\vec{\nabla} m_y)^2 + (\vec{\nabla} m_z)^2 \right] - K_u (\vec{m} \cdot \vec{u})^2 \right\} dV + \int_V \left\{ -\mu_0 M_s (\vec{m} \cdot \vec{H}) - \frac{\mu_0}{2} M_S \left[\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_M(\vec{r}) \right] \right\} dV . \quad (3.18)$$

El estado (o estados) estable de un objeto magnético viene dado por la competencia entre estos diferentes términos de energía. El estado de equilibrio corresponde a la configuración del campo de magnetización que minimiza localmente esta energía funcional.

3.4. mumax³

Existe una extensa lista de paquetes de software micromagnéticos en la literatura, aunque el esquema de discretización difiere de uno a otro (diferencias finitas o elementos finitos). En esta tesis hemos elegido el código mumax³ (Vansteenkiste et al., 2014), que es un programa de simulación micromagnético acelerado por GPU, y es un software de código abierto escrito en Go6 y CUDA7 y que está disponible gratuitamente bajo la licencia GPLv3. Aparte del controlador GPU de nVIDIA, no se requieren otras

dependencias para ejecutar mumax³.

mumax³ calcula la dinámica de magnetización dependiente del espacio y del tiempo en ferromagnetos de tamaño nano a micro utilizando una discretización del espacio de diferencias finitas, dentro de una cuadrícula 2D o 3D de celdas elementales ortorrómbicas. Las cantidades volumétricas, como la magnetización y el campo efectivo, son consideradas en el centro de cada celda. Por otro lado, las cantidades de acoplamiento, como la interacción de intercambio, son consideradas en las caras entre las celdas.

Para conservar la memoria, los parámetros del material dependientes del espacio no son almacenados explícitamente por celda, sino que a cada celda se le atribuye un índice de región entre 0 y 256. Diferentes índices de región representan diferentes materiales. Los parámetros reales del material son almacenados en tablas de búsqueda de 256 elementos, indexados por el índice de región de la celda.

Los parámetros de acoplamiento, como la interacción de intercambio, son almacenados en una matriz triangular indexada por los números de región de las dos celdas que interactúan. Esto permite un acoplamiento de intercambio arbitrario entre todos los pares de materiales.

Las excitaciones, como el campo aplicado externamente o la densidad de corriente eléctrica, son configuradas en función de la región y del tiempo del mismo modo que los parámetros del material. Además, pueden tener un número arbitrario de términos adicionales de la forma $f(t)g(x, y, z)$, donde $f(t)$ es cualquier función del tiempo multiplicada por un perfil espacial $g(x, y, z)$ que varía continuamente. Esto le permite modelar excitaciones suaves que dependen del tiempo y el espacio, como por ejemplo el campo RF de una antena o una corriente eléctrica AC.

mumax³ utiliza geometría sólida constructiva (Constructive Solid

Geometry) para definir la forma del ferromagneto y de las regiones materiales dentro de él. Cualquier forma (shape) está representada por una función $f(x, y, z)$ que devuelve verdadero cuando un punto de coordenadas cartesianas (x, y, z) se encuentra dentro de la forma, o falso en caso contrario. Por ejemplo, una esfera de radio r , centrada en el origen del sistema de coordenadas, está representada por la función $x^2 + y^2 + z^2 \leq r^2$. Las formas se pueden rotar, trasladar, escalar y combinar con operaciones booleanas como AND, OR, XOR. Esto permite definir, mediante programación, geometrías complejas y parametrizadas.

El input de mumax³ es un script que proporciona un lenguaje de programación dedicado y que se asemeja a un subconjunto del lenguaje de programación Go. El script proporciona un medio sencillo para definir simulaciones bastante complejas. Un ejemplo de script que realiza un ciclo de histéresis se ilustra en la Fig. 3.4. Un ejemplo del script usado en este trabajo se muestra en el anexo A.2.

```

SetGridsize(128, 32, 1)
SetCellsize(4e-9, 4e-9, 30e-9)

Msat = 800e3
Aex = 13e-12

m = randomMag()
relax() // high-energy states best minimized by relax()

Bmax := 100.0e-3
Bstep := 1.0e-3
MinimizerStop = 1e-6
TableAdd(B_ext)

for B:=0.0; B<=Bmax; B+=Bstep{
  B_ext = vector(B, 0, 0)
  minimize() // small changes best minimized by minimize()
  tablesave()
}

for B:=Bmax; B>=-Bmax; B-=Bstep{
  B_ext = vector(B, 0, 0)
  minimize() // small changes best minimized by minimize()
  tablesave()
}

for B:=-Bmax; B<=Bmax; B+=Bstep{
  B_ext = vector(B, 0, 0)
  minimize() // small changes best minimized by minimize()
  tablesave()
}

```

Figura 3.4. Ejemplo se input de mumax³ que realiza un ciclo de histéresis.

Capítulo 4

DINAMICA DE ESPIN ACELERADA

Los resultados que se presentan en este capítulo fueron publicados en la revista científica *Advanced Theory and Simulations*. El artículo correspondiente se incluye en el Anexo B.2, al final de esta tesis.

4.1. Enfoque de la Dinámica de espín acelerada

Como se vio en la sección 3.2, la aplicación de la dinámica de espín a nanosistemas reales llevaría a tiempos de simulación demasiados grandes (~ 1 siglo), imposibles de obtener un resultado a las soluciones de las ecuaciones LLG. Una posible solución es la de utilizar la técnica de escalamiento, descrita en la sección 3.2, para reducir el número de espines a considerar en el sistema, pero aquí surge la pregunta ¿se puede utilizar esta técnica en la solución de las ecuaciones de la dinámica de espines?

Para responder la pregunta anterior, hay que tener en cuenta tres ingredientes importantes que se consideran en la dinámica de espines y que pueden sufrir cambios al aplicar la técnica del escalamiento:

- (i) Los términos que componen el Hamiltoniano del sistema,
- (ii) El tiempo,

(iii) La temperatura.

El punto (i) se refiere a las interacciones presentes en el sistema, como las mencionadas en la sección 2.2. El modo en que escalan cada uno de estos términos es parte de la teoría de la técnica de escalamiento y es conocido para las interacciones de intercambio, anisotropía, dipolar y de Zeeman. Dado que en la ecuación de LLG el campo efectivo \vec{H}_{eff} se define a partir de la derivada funcional del Hamiltoniano con respecto a los espines, el escalamiento de las interacciones energéticas se refleja de manera directa en los campos efectivos y, por ende, en los torques que gobiernan la dinámica del sistema.

El problema del escalamiento de la temperatura, que se menciona en el punto (iii), también ya ha sido discutido en la referencia (Velásquez et al., 2013). En este trabajo se demuestra que la temperatura debe escalar linealmente con el factor de escalamiento J'/J , con J y J' las constantes de intercambio del sistema real y del sistema escalado, respectivamente.

Queda todavía la discusión del punto (ii), es decir, ¿cómo debería escalar el tiempo para poder aplicar la técnica de escalamiento? Para responder a esta pregunta vamos a tomar como caso el movimiento de paredes de dominios (DW) en un nanoalambre, para el cual el tiempo es una cantidad clave. Este fenómeno constituye un caso de estudio particularmente adecuado, ya que la propagación de paredes de dominio es un proceso dinámico no trivial en el que intervienen de manera simultánea la precesión, el amortiguamiento y la competencia entre las interacciones magnéticas fundamentales. Además, su dinámica está caracterizada por escalas temporales bien definidas y accesibles tanto experimental como numéricamente, lo que permite evaluar de forma cuantitativa el efecto del escalamiento sobre la evolución temporal del sistema.

Aprovechamos los amplios datos experimentales y de simulación

sobre muestras granulares de Fe y seleccionamos, como sistema de estudio, muestras típicas de forma cilíndrica que consisten en el crecimiento de Fe a lo largo de la dirección [110], con los momentos magnéticos ubicados en una red bcc. Consideramos el parámetro de red como $a = 2.86 \text{ \AA}$ y un momento magnético $\mu = 2.2\mu_B$ (Mazo-Zuluaga et al., 2016). Aquí utilizamos alambres de $D = 45$ y 60 nm de diámetro, y $L = 500, 1000, 1500, 2000$ y 2500 nm de longitud (ver Fig. 4.1).

En este estudio no se incluye la anisotropía porque consideramos materiales policristalinos y también para minimizar el número de parámetros que representan el sistema y concentrarnos más en la variable tiempo. Entonces el Hamiltoniano magnético que representa los nanoalambres es

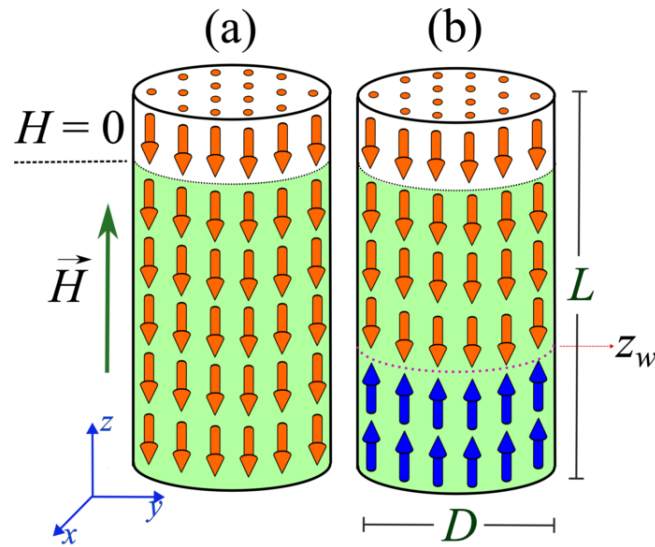


Figura 4.1. Representación esquemática de los nanoalambres con dimensiones (D, L) . (a) Configuración inicial (en $t = 0$) con espines a lo largo de la dirección $-z$. El campo magnético se aplica en la región sombreada en verde. (b) Configuración magnética para $t > 0$ después de la nucleación e inversión de algunas capas. z_w muestra la posición del DW.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mag}(\vec{r}, \vec{s}) = & -\mu_B \mu_0 \sum_{i,j=1}^N g_i \vec{s}_i \cdot \vec{H} - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N J(r_{ij}) \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + \\ & - \sum_{i \neq j}^N \frac{g_i g_j}{r_{ij}^3} \left((\vec{s}_i \cdot \hat{e}_{ij})(\vec{s}_j \cdot \hat{e}_{ij}) - \frac{1}{3}(\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \right) . \end{aligned} \quad (4.1)$$

Recordemos que \vec{s}_i son vectores unitarios que apuntan en la dirección del espín, y $\hat{e}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ es el vector unitario a lo largo de la dirección que conecta los pares de espines.

Para fines de comparación, utilizamos los dos enfoques de simulación y los programas computacionales introducidos en el capítulo 3, esto es: la dinámica de espines junto con la técnica de escalamiento, al que denominaremos dinámica de espín acelerada o FASD (Fast Spin Dynamics), y las simulaciones micromagnéticas como se encuentra implementada en el software mumax³.

Para obtener el enfoque FASD relacionado, implementamos el esquema de dinámica de espín (sección 3.1) en muestras reducidas que se caracterizan por dimensiones laterales (D', L') para estudiar el comportamiento de los sistemas reales de dimensiones laterales (D, L) . Para hacer esto, las muestras (D, L) fueron reducidas para obtener las (D', L') a través de las relaciones de escala dadas por:

$$E' = \lambda E'_{exc} + E'_{dip} + E'_Z , \quad (4.2)$$

y

$$D' = \gamma D, \quad L' = \gamma L , \quad (4.3)$$

con $\lambda = \gamma^{1.8}$ y $\gamma = 0.0215, 0.0261, 0.0301$. El exponente 1.8 es el valor para los sistemas basados en Fe, como fue reportado por Velásquez et al. (2015). Por lo tanto, la constante de intercambio escalada se puede escribir como

$$J' = \lambda J = \gamma^{1.8} J . \quad (4.4)$$

Las relaciones de escala y el exponente empleado en las ecuaciones (4.2)–(4.4) se fundamentan en la técnica FAST desarrollada y validada en Velásquez et al. (2015), donde se combinan escalamiento geométrico y energético con simulaciones de Monte Carlo. En el presente trabajo, utilizamos el mismo escalamiento geométrico y de energías, pero aplicado a simulaciones de dinámica de espines mediante la ecuación LLG. La referencia citada demuestra que estas transformaciones producen sistemas reducidos físicamente equivalentes a los originales, preservando la competencia relativa entre las energías de intercambio, dipolar y de Zeeman, lo que asegura que los resultados obtenidos en sistemas reducidos puedan re-escalarse de manera confiable a las dimensiones reales del sistema.

Estos valores permiten ejecutar las simulaciones en tiempos adecuados dentro de los recursos computacionales disponibles actualmente, manteniendo la relación de aspecto de la geometría de las muestras. Para la temperatura utilizamos 10 K y el esquema de escala $T' = (J'/J)T$, como se explicó anteriormente. Los valores del campo magnético se consideran entre 0.2 y 0.5 T en intervalos de 0.05 T.

Para el cálculo de los promedios de las cantidades físicas, independientemente del enfoque utilizado (FASD o mumax³), se consideran al menos 10 semillas estadísticamente independientes; y se utilizan hasta 40 semillas en aquellos casos en los que fue necesario para reducir las incertidumbres estadísticas.

Para el estudio de la propagación de las DWs, en ambos casos FASD y mumax³, se selecciona una configuración inicial saturada a lo largo de la dirección $-z$, como se muestra en la 4.1. Luego, se fija un campo magnético constante a lo largo del eje $+z$ para originar la inversión magnética. Además, en los casos en que es necesario, con el fin de lograr la nucleación de una única DW solamente en uno de los extremos del alambre, se establece un campo nulo en la región del extremo superior (20 % de la longitud final, representado por la región sombreado en verde en la Fig. 4.1).

Además, en los casos en que es necesario, con el fin de lograr la nucleación de una única DW solamente en uno de los extremos del alambre, se establece un campo nulo en la región del extremo superior (20 % de la longitud final, representado por la región sombreada en verde en la Fig. 4.1). Esta región de campo cero se introduce únicamente como un procedimiento controlado para asegurar que la DW se origine desde un extremo específico y evitar la nucleación simultánea en ambos extremos, lo cual permite un estudio sistemático de la propagación de una única DW. Cabe señalar que, como se discute en la subsección 4.2, el efecto de esta discontinuidad en la dinámica de la DW es limitado y no altera de manera significativa la propagación en la región de interés del nanohilo, donde se analiza su dinámica para estudiar cómo se debe escalar el tiempo en esta metodología.

Para localizar la posición de la DW, utilizamos la componente z de la magnetización de la capa ubicada en la posición z , que está definida por

$$\mu_z(z) = \frac{1}{M(z)} \sum_{i=1}^{N(z)} \mu_{iz}, \quad (4.5)$$

donde $N(z)$ es el número de espines en la capa ubicada en la coordenada z , y $M(z) = \mu_B N(z)$ su magnetización de saturación. Entonces, vamos a decir

que el centro de la DW está pasando por una capa dada, cuando en esa capa la cantidad $\mu_z(z)$ cambia de signo.

Este criterio para localizar el centro de la DW, basado en el cambio de signo de μ_z , ha sido ampliamente utilizado en la literatura de dinámica de espines en nanohilos (Al Bahri and Al-Kamiyani, 2025). Físicamente, en una DW entre dominios completamente alineados en $+z$ y $-z$, la magnetización en el centro debe ser perpendicular al eje z , lo que coincide con la condición $\mu_z \approx 0$. Aunque existen métodos más sofisticados, como ajustes funcionales tipo tanh o perfiles continuos de magnetización, considerando que se trata de un sistema discreto dichas funciones continuas no serían tan útiles. El método empleado aquí es suficiente para determinar la posición de la DW con precisión de una capa y permite calcular velocidades confiables de propagación, manteniendo además la estabilidad numérica y eficiencia computacional.

La Fig. 4.2 muestra las posiciones de la DW en los sistemas escalados (z'_w) en función del tiempo, calculadas mediante el enfoque FASD y las relaciones de escala reportadas en las ecuaciones (4.2) y (4.3). Se muestran los resultados para una muestra típica con $D = 60$ nm y $L = 1000$ nm. En este caso, el campo magnético se establece en $H = 0.4$ T y se utilizan los valores para el factor de escala $\gamma = 0.0215, 0.0261, 0.0301$. Las respectivas líneas horizontales de colores indican los valores escalados por encima de los cuales los campos magnéticos son nulos para cada caso. Como se observa, se obtienen comportamientos funcionales similares de las propagaciones DW independientemente del valor.

En este punto es necesario recordar que, según la metodología de escalamiento, los exponentes de escala de aquellas magnitudes asociadas a la descripción del sistema en estudio se obtienen cuando las curvas re-escaladas

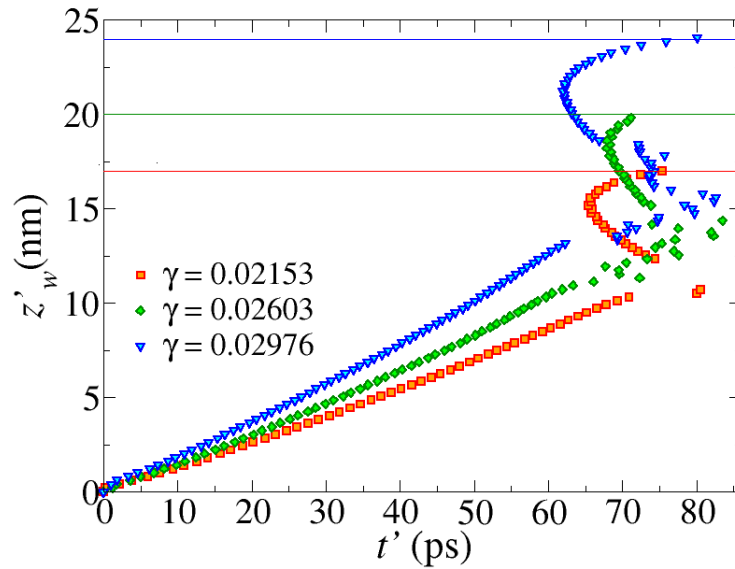


Figura 4.2. Posición de la DW en función del tiempo en un nanoalambre escalado con dimensiones originales $D = 60$ nm y $L = 1000$ nm. El campo magnético usado es de $H = 0.4$ T y factores de escala $\gamma = 0.0215$ (cuadrados rojos), 0.0261 (rombos verdes) y 0.0301 (triángulos azules). Las respectivas líneas horizontales de colores indican los valores escalados hasta los cuales se aplica el campo magnético.

coinciden, es decir, cuando se superponen para todos los valores del factor de escala γ . Considerando la Fig. 4.2, se observa que las cantidades físicas involucradas en la descripción de la fenomenología abordada en el presente estudio son la posición de la DW z'_w (que corresponde a la longitud medida a lo largo del nanoalambre) y el tiempo t' , que representa el tiempo escalado. Se conoce como las longitudes escalan, pero no se sabe cómo debe escalar el tiempo para poder combinar la técnica de escalamiento con la dinámica de espines.

Los comportamientos de los sistemas reales (D, L) se obtienen ampliando los sistemas escalados (D', L') utilizando las ecuaciones (4.3), es decir, $D = D'/\gamma$ y $L = L'/\gamma$. Para obtener la superposición deseada en las curvas z_w vs t reales, vamos a considerar que el tiempo escala como

$$t' = \gamma^n t. \quad (4.6)$$

Probamos varios valores para el exponente de escala n del tiempo y encontramos que $n = 0$ es el valor que conduce a la mejor superposición de las curvas para todos los factores de escala utilizados y en todo el rango en el que se aplicó el campo magnético. En otras palabras, el tiempo transcurre igual tanto en el sistema escalado como en el real y, por lo tanto, en el Fast Spin Dynamics no se requiere escalamiento en el tiempo. Esto ha sido confirmado para varios valores de D y L , como se puede observar en la Fig. 4.3 a través del solapamiento obtenido entre las curvas ejecutadas para los diferentes valores utilizados para el factor de escala γ .

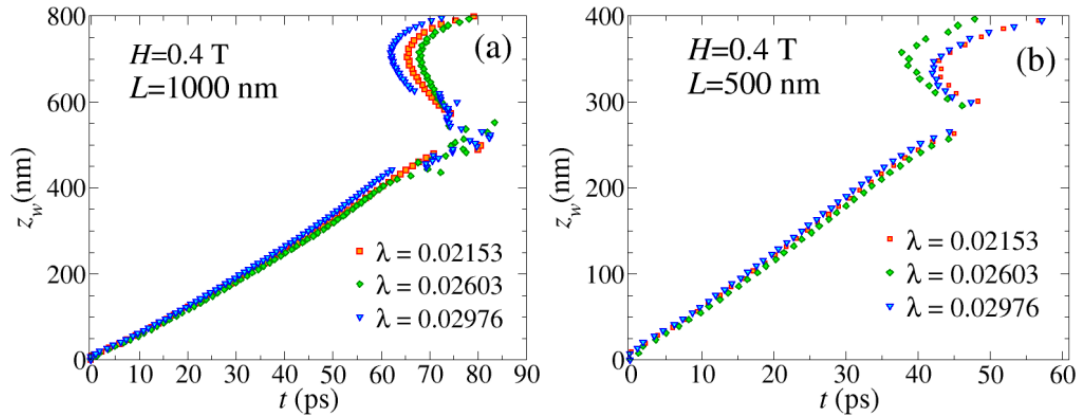


Figura 4.3. Posición real de la DW (z_w) en función del tiempo con un campo magnético $H = 0.4$ T y $\gamma = 0.0215, 0.0261, 0.0301$, para nanoalambres con $D = 60$ nm y dos longitudes diferentes: (a) $L = 1000$ nm y (b) $L = 500$ nm.

Este es un resultado clave; de hecho, permite comparaciones cuantitativas de los resultados provenientes del enfoque FASD aquí propuesto y los provenientes de otras técnicas computacionales, así como de desarrollos experimentales. También vale la pena señalar que ya se han informado resultados cualitativos similares para el movimiento de las DWs

mediante el uso de simulaciones de Monte Carlo (Mejía-López et al., 2018; Mazo-Zuluaga et al., 2016), sin embargo, en esas publicaciones el tiempo se reporta en unidades de pasos de Monte Carlo y, en consecuencia sólo se podrían realizar comparaciones cualitativas, en lugar de comparaciones con tiempo real.

4.2. Comparación entre FASD y cálculos micromagnéticos

La sección anterior demuestra que el tiempo no escala dentro del FASD, con lo cual podemos obtener la dinámica de espines desde un sistema escalado. Podemos comparar los resultados que se obtienen una vez re-escalado un sistema con lo que se consigue para el mismo sistema pero usando simulaciones de micromagnéticas.

En los cálculos micromagnéticos utilizamos los mismos nanoalambres, de la sección anterior, como entradas al software mumax³. Se considera celdas unitarias de $3 \times 3 \times 3$ nm, y los parámetros magnéticos del Fe-bcc para este enfoque micromagnético son: la saturación de magnetización $M_S = 1.707 \times 10^6$ A/m, la rigidez de intercambio $A = 4.817734 \times 10^6$ J/m y la constante de amortiguación $\lambda_i = 0.02$ en la ecuación de LLG (2.44). Estos valores concuerdan con los empleados en el enfoque FASD.

La Fig. 4.4 muestra la comparación entre los resultados obtenidos de nuestro enfoque FASD propuesto y los de las simulaciones micromagnéticas usando mumax³ para un nanoalambre seleccionado con $D = 60$ y $L = 1000$ nm, y usando $H = 0.3$ y 0.4 T. Note que, a pesar que $L = 1000$ nm, en la figura se muestra solo hasta 800 nm, valor por debajo del cual el campo magnético no es nulo. Resultados para otros valores de los parámetros exhiben comportamientos similares.

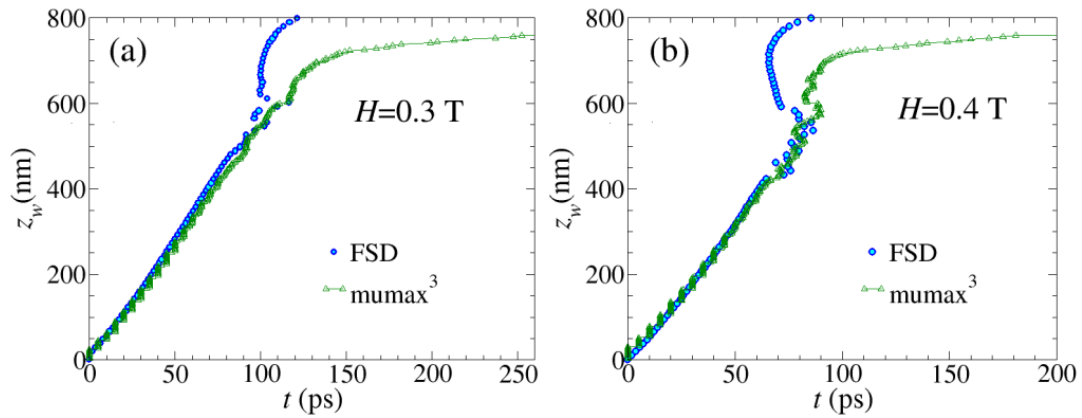


Figura 4.4. Comparación entre el FSD y las simulaciones micromagnéticas con mumax³. Resultados para la posición de la DW en función del tiempo para nanoalambres con $D = 60$ y $L = 1000$ nm, usando $\gamma = 0.02143$, y para dos valores de campo magnético diferentes (a) $H = 0.3$ T y (b) $H = 0.4$ T.

Se observa una notable concordancia en la propagación de la DW entre los resultados de los dos enfoques diferentes hasta aproximadamente 600 nm. Existen algunas diferencias más allá de los 600 nm, que se deben a la diferente naturaleza de la forma en que se considera el sistema en ambos enfoques, y también a la discontinuidad no física en el campo magnético. Vale la pena recordar que esta región de campo magnético cero se impone manualmente para obtener la nucleación y propagación de la DW desde un solo extremo del nanoalambre, como se discutió en la Sec. 4.1.

En efecto, en el caso de FSD, el sistema se considera como un conjunto de momentos magnéticos que siguen un esquema discreto (atómico), mientras que en la implementación del enfoque micromagnético en mumax³ se considera un modelo de distribución continua. Este hecho da lugar a diferencias en la forma en que la DW responde a las interacciones presentes al llegar a la capa en la que el campo magnético desaparece repentinamente. Es decir, en el modelo continuo micromagnético, la magnetización puede variar más lenta y suavemente que en el caso del

FASD, dada la naturaleza discreta de la disposición atomística. Esto, a su vez, afecta la interacción dipolar cuando una gran parte del sistema se ha invertido e interactúa con la región no invertida a lo largo del alambre. En el caso discreto, debido a la imposibilidad de realizar cambios continuos (infinitesimales), la configuración magnética debe ser ferromagnética para minimizar esta energía dipolar. Así, existe una tendencia a generar una nueva nucleación. Por el contrario, en el caso continuo se genera una DW más larga, que separa los dos dominios magnéticos. Cabe enfatizar que, dado que FASD y el micromagnetismo se basan en hipótesis físicas diferentes, discreto atomístico versus continuo micromagnético, no es esperable una coincidencia cuantitativa exacta en todas las condiciones de simulación. La concordancia entre ambos enfoques debe evaluarse bajo situaciones en las que las hipótesis de los modelos conduzcan al mismo comportamiento físico, lo cual no se cumple en la vecindad de una discontinuidad abrupta del campo magnético. En este régimen, las diferencias observadas reflejan de manera natural los distintos supuestos de modelado, sin afectar la validez del método propuesto.

Esto se puede confirmar eliminando la región de campo cero en las muestras cuyos resultados se muestran en la Fig. 4.5 para nanoalambres de $D = 60$ y $L = 1000$ nm y dos valores de campo magnético diferentes. En estos casos, al aplicar el campo magnético en todo el nanoalambre, debido a la menor coordinación de los espines en los límites de cada extremo de la muestra, se obtienen dos nucleaciones (una en cada extremo del alambre), dando lugar a los desplazamientos de dos DW que se mueven hacia el centro del sistema (observado como las dos ramas que comienzan en $t = 0$ en $z_w = 0$ y 1000 nm). Como se observa, los resultados de ambos enfoques

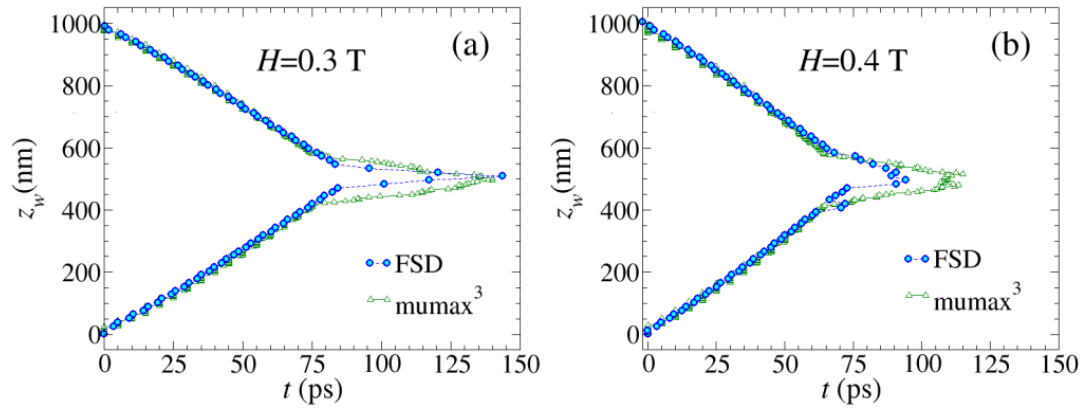


Figura 4.5. Comparación entre la FSD y las simulaciones micromagnéticas con mumax^3 . Resultados para la posición de la DW en función del tiempo para nanoalambres con $D = 60$ y $L = 1000$ nm, usando $\gamma = 0.0215$, y para dos valores de campo magnético diferentes (a) $H = 0.3$ T y (b) $H = 0.4$ T. El campo magnético es aplicado sobre todo el nanoalambre.

concuerdan muy bien, sin que aparezcan nuevas nucleaciones. Además, el cambio en la velocidad de propagación de las DWs (desaceleración de velocidad observada alrededor de 75 ps) se debe al efecto de la interacción dipolar entre las dos DW que se propagan en direcciones opuestas cuando están lo suficientemente cerca.

Podemos obtener otro ejemplo de comparación entre los dos enfoques calculando la velocidad media de la DW en función del campo magnético, la cual se muestra en la Fig. 4.6 para un nanoalambre de $D = 60$ nm y $L = 1000$ nm.

Además, los resultados muestran una velocidad constante de la DW con el campo magnético aplicado, de acuerdo con informes anteriores que abordan los movimientos de la DW en el régimen viscoso, que tiene lugar por debajo del límite de Walker (Altbir et al., 2020; Mougín et al., 2007). Como se observa, se obtiene nuevamente una muy buena concordancia entre los resultados obtenidos del enfoque FSD propuesto y la solución en el enfoque

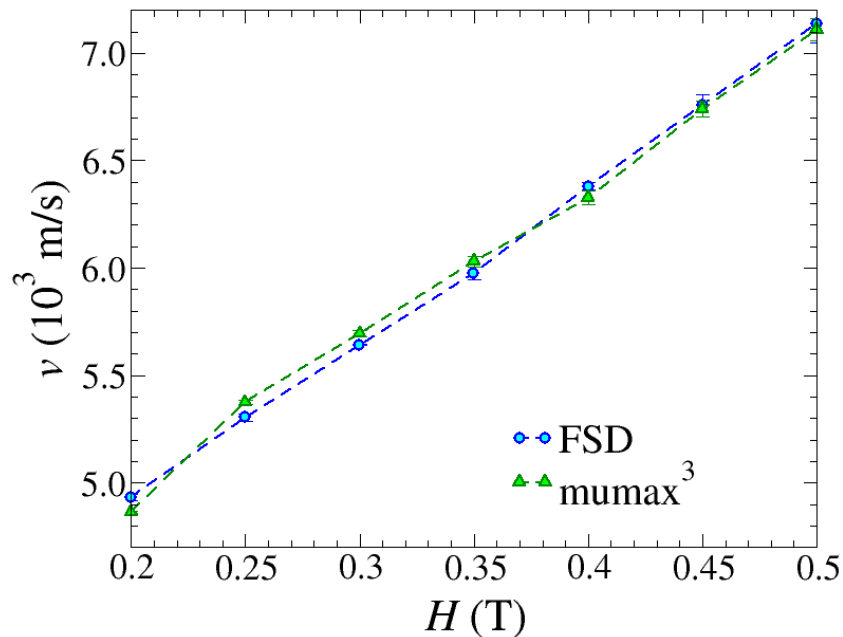


Figura 4.6. Comparación entre la FASD (círculos azules) y las simulaciones micromagnéticas con mumax³ (triángulos abiertos). Resultados para la velocidad media de la DW en función del campo magnético aplicado para $D = 60$ y $L = 1000$ nm.

micromagnético implementado en el software mumax³.

Los resultados precedentes nos permiten concluir que el exponente de escalamiento para el tiempo es 0, lo que implica que no es necesario considerar una función de escalamiento al pensar en la combinación del enfoque de Dinámica de espines con la Técnica de Escalamiento; y que ahora es posible utilizar el enfoque Fast Spin Dynamics, propuesto aquí, para estudiar fenómenos dinámicos en tiempo real, lo que no se puede llevar a cabo con el método Fast Monte Carlo. Cabe enfatizar que $n = 0$ no es una elección, sino una condición intrínseca que se cumple para cualquier sistema al aplicar la técnica de escalamiento junto con la dinámica de espines (FASD).

Procedimiento práctico de aplicación de FASD

Para la implementación práctica, el proceso de estudio de una muestra mediante el enfoque FASD consta de los siguientes pasos:

- (i) Elegir el material y el tamaño (D, L) del sistema real que se quiere estudiar.
- (ii) Seguir el procedimiento descrito en la última parte de la sección 3.2 para obtener el valor del exponente de escalamiento δ para el material de interés (recordemos que $\delta = 1.8$ para el caso del Fe).
- (iii) Elegir un factor de escala γ que se aplicará al sistema real (D, L) mediante el uso de las ecuaciones (4.3) para obtener el sistema reducido que presentan las dimensiones laterales (D', L') .
- (iv) Con estos valores de δ y γ , encontrar el valor de la constante de intercambio escalada como $J' = \gamma^\delta J$.
- (v) Aplicar la dinámica de espines estándar (i.e., resolver las ecuaciones LLG) para la muestra escalada (D', L') con la constante de intercambio escalada J' .
- (vi) Finalmente, las magnitudes con dimensiones de longitud se re-escalan al tamaño real y los resultados así obtenidos corresponden a los del sistema real.

4.3. Evaluación del enfoque FASD aplicado a la dinámica del estado S en Permalloy

Como otra prueba de validación de nuestro enfoque FASD, realizamos simulaciones dinámicas correspondientes al *Problema Estándar #4* de μ Mag, propuesto por el *National Institute of Standards and Technology* (NIST) (<https://www.ctcms.nist.gov/~rdm/std4/spec4.html>). Este problema se centra en la respuesta dinámica de una

monocapa de Permalloy (estructura fcc) bajo condiciones específicas de un campo magnético externo aplicado.

A continuación se describe el Problema Estándar #4 de $\mu\text{Mag}/\text{NIST}$, detallando las condiciones iniciales y externas del sistema tal como se enuncian en la especificación oficial. Los resultados obtenidos mediante nuestro enfoque FASD se presentan posteriormente para comparar y validar el estado de equilibrio descrito

La configuración inicial de la magnetización corresponde a un estado de equilibrio en forma de S , obtenido al aplicar un campo magnético de saturación en la dirección $[111]$ y reducirlo gradualmente hasta cero. Entonces, se analiza la evolución temporal de la magnetización a medida que el sistema se relaja hacia un nuevo equilibrio bajo la acción de un campo magnético aplicado en una dirección diferente al del campo de saturación. Los campos magnéticos externos que se usan en el análisis de este problema son: uno de magnitud 25 mT aplicado en el plano de la monocapa a 170 grados en sentido antihorario desde el eje x positivo, y otro de 36 mT aplicado en el plano de la monocapa a 190 grados en sentido antihorario desde el eje x positivo

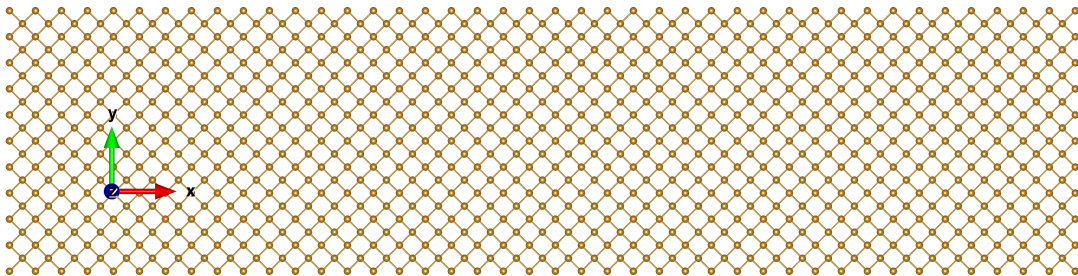


Figura 4.7. Representación de la estructura geométrica utilizada en el estudio de la dinámica del estado S correspondiente al *Problema Estándar #4* de μMag

Se requieren dos resultados para la comparación: (1) las componentes (x, y, z) de la magnetización promediada espacialmente de la muestra en

función del tiempo desde $t = 0$ hasta que la muestra alcanza el equilibrio en el nuevo campo. (2) Una imagen de la magnetización en el momento en que el componente x de la magnetización promediada espacialmente cruza por primera vez cero.

Los valores de magnetización en los datos de la serie temporal deben normalizarse mediante M_s . Los datos de la serie temporal son necesarios para realizar una comparación detallada entre soluciones. Las imágenes de magnetización sirven para comprobar si existen diferencias en los mecanismos de inversión si los datos temporales entre soluciones son diferentes.

La geometría usada es una lámina de longitud 500 nm y ancho 125 nm que se obtiene al aislar un solo plano (001) del Permalloy fcc, como se muestra en la figura 4.7, de parámetro de red $a = 3.55 \text{ \AA}$. Los parámetros utilizados para el Permalloy en los estudios micromagnéticos son la constante de rigidez de intercambio $A = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ y la magnetización de saturación $M_s = 8.0 \times 10^5 \text{ A/m}$. Estos valores fueron convertidos a sus equivalentes en el modelo discreto, obteniéndose una constante de intercambio $J_{ex} = 1.6975 \text{ meV}$ y una razón giromagnética $g = 0.9648$.

Además, para garantizar una comparación coherente entre las simulaciones atómicas y micromagnéticas, se realizaron dos ajustes clave. En primer lugar, se adoptó una constante de amortiguamiento aumentada $\alpha = 0.08$, en lugar de $\alpha = 0.02$ usado en micromagnetismo. Esto es debido a que, en el modelo atómico, hay que compensar la ausencia de mecanismos explícitos de disipación microscópica (por ejemplo, acoplamiento con fonones o electrones), los cuales sí están incorporados efectivamente en la formulación continua. Este ajuste está respaldado por estudios previos (Ellis et al. (2015); Evans et al. (2014); Lenzing et al. (2025); Nagyfalusi et al.

(2025)) y asegura una dinámica de relajación realista.

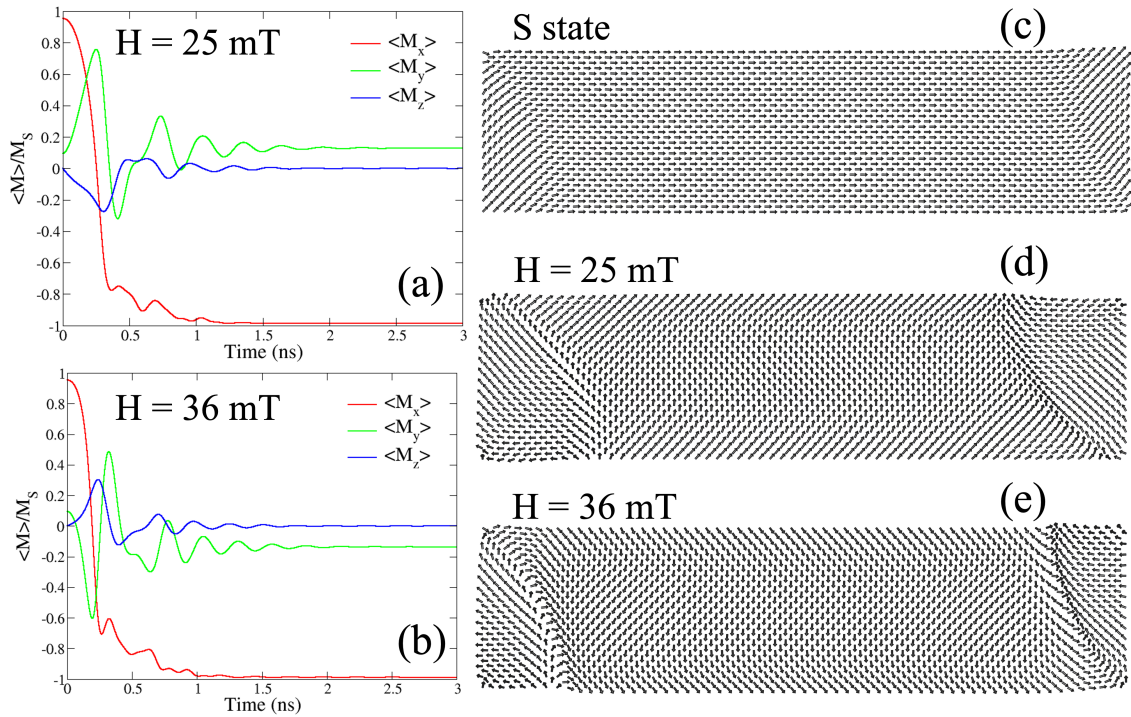


Figura 4.8. Resultados de la simulación para el *Problema Estándar #4* del NIST utilizando el enfoque FASD. El estado inicial en forma de S obtenido tras la eliminación del campo de saturación aplicado en la dirección $[1\ 1\ 1]$ (c). Evolución temporal de la magnetización promedio cuando el sistema es sometido a un campo externo $H = 25$ mT orientado en la dirección $(\theta, \phi) = (90^\circ, 170^\circ)$ (a), y a $H = 36$ mT en la dirección $(\theta, \phi) = (90^\circ, 190^\circ)$ (b). Estado final correspondiente, en el cual $M_x = 0$, para el caso de $H = 25$ mT (d), y para $H = 36$ mT (e).

En segundo lugar, aunque normalmente el campo magnético externo no se escala dentro de la técnica de escalamiento (ya que la energía de Zeeman se calcula por espín), encontramos necesario aplicar un campo aproximadamente dos veces mayor que en el caso micromagnético. Esto se debe a que, en el sistema reducido, la intensidad relativa de la interacción dipolar aumenta. Esta intensidad relativa se puede cuantificar como la relación entre la energía dipolar total E_{dip} y la energía de intercambio total E_{ex} , o de manera equivalente como la energía dipolar promedio por espín

respecto a la energía de intercambio promedio por espín. Al ser mayor esta relación, la energía dipolar estabiliza la configuración magnética y dificulta el desplazamiento de las paredes de dominio (DW), ya que cualquier movimiento incrementaría localmente la energía dipolar más que la reducción en energía de intercambio. El aumento del campo externo restaura el balance energético entre las contribuciones de intercambio y dipolar, produciendo una respuesta dinámica efectiva comparable a la del sistema original. Este ajuste en el campo magnético es coherente con el espíritu del enfoque de escalamiento y resulta esencial para reproducir un comportamiento continuo en el modelo atómico.

La Figura 4.8 presenta los resultados de estas simulaciones. En el panel (c) se muestra el estado inicial en forma de S obtenido tras eliminar el campo de saturación aplicado en la dirección $[111]$ que está de acuerdo con lo que se obtienen en cálculos continuos (ver Figura 4.9c).

Esta configuración fue luego sometida a un campo externo $H = 25$ mT orientado en la dirección $(\theta, \phi) = (90^\circ, 170^\circ)$, y se registró la evolución temporal de la magnetización promedio (Fig. 4.8(a)). El estado final correspondiente, en el cual $M_x = 0$, se muestra en la Fig. 4.8(d). Las Figuras 4.8(b) y (e) muestran los resultados para el caso en el que se aplica un campo $H = 36$ mT en la dirección $(\theta, \phi) = (90^\circ, 190^\circ)$.

Como se puede notar, estos resultados están en muy buen acuerdo con los reportados por el NIST lo que nuevamente respalda la fiabilidad y validez de nuestro enfoque FASD. En los dos enfoques (FASD y micromagnetismo) observamos que el estado en S se obtiene al aplicar un campo magnético de saturación en la dirección $[111]$, que al ser retirado lentamente permite al sistema relajarse hacia una configuración no uniforme de equilibrio, donde las DWs están naturalmente presentes (Figuras 4.8c y 4.9c). Es un estado de

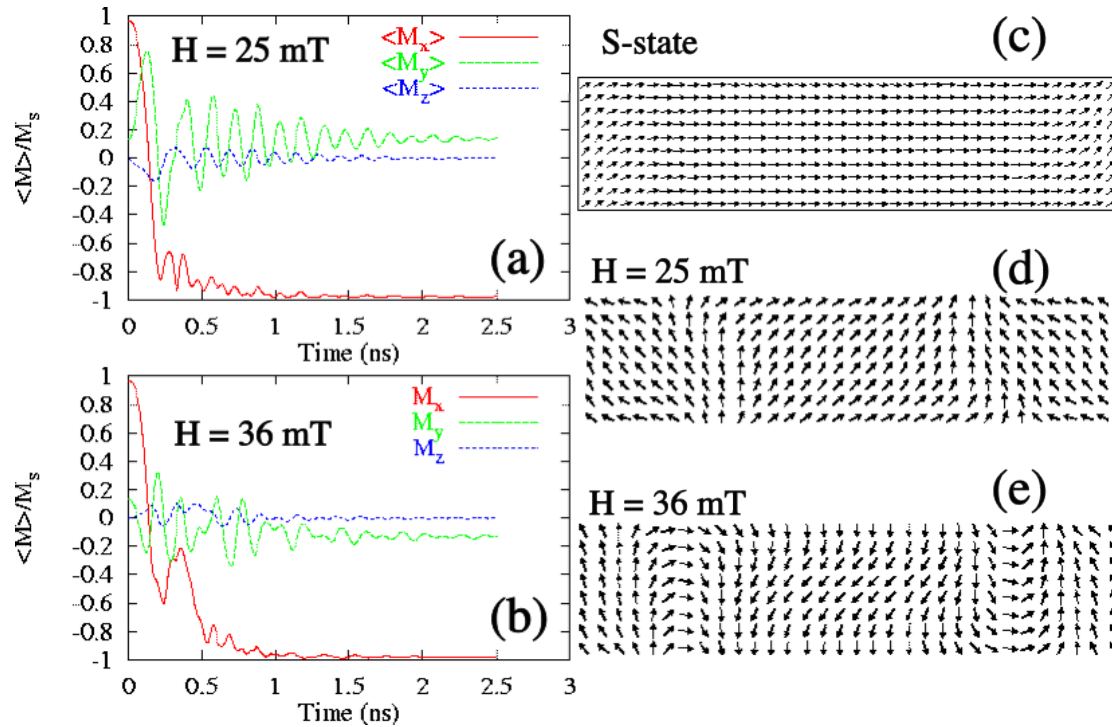


Figura 4.9. Resultados para el *Problema Estándar #4* del NIST. Las condiciones son las mismas que el del la Figura 4.8 pero calculado usando micromagnetismo (Tomada desde <https://www.ctcms.nist.gov/rdm/std4/Albuquerque.html>).

alta energía intermedia, pero suficientemente estable como punto de partida. Luego al aplicar los campos magnéticos externos con diferentes magnitudes y distintas direcciones en el plano de la muestra, se induce una reorganización de la estructura de dominios, principalmente a través del movimiento de las paredes de dominio. Este movimiento es un proceso dinámico guiado por la competencia entre las interacciones de intercambio, campo externo y, muy especialmente en este caso, la interacción dipolar (Figuras 4.8d-e y 4.9d-e).

A lo largo de la evolución temporal, el sistema tiende a alinearse con el campo aplicado, lo que implica el colapso o desplazamiento de dominios y la eventual desaparición del componente M_x (proyección de la magnetización en una dirección específica, ver Figuras 4.8a-b y 4.9a-b). Esta transición ocurre en escalas de tiempo del orden de nanosegundos, lo que convierte

al problema en una excelente prueba para estudiar dinámicas rápidas. La razón por la que este problema es ampliamente usado como estándar es porque presenta una situación intermedia entre estados altamente ordenados y completamente aleatorios, lo que permite evaluar la capacidad de un modelo para capturar no solo la relajación magnética sino también los procesos colectivos involucrados, como el movimiento coherente de las DWs.

En nuestro caso, los resultados obtenidos con el enfoque FASD reproducen correctamente la evolución de la magnetización y las configuraciones finales, mostrando buena concordancia con los resultados micromagnéticos de referencia. Esto confirma que FASD es capaz de capturar de manera realista la física esencial del problema, incluyendo la interacción entre dominios, la respuesta al campo aplicado y el proceso de relajación hacia el equilibrio.

Capítulo 5

PAREDES DE DOMINIO EN DIFERENTES ESTRUCTURAS

Como paso final, aprovechando la utilidad del método FASD presentado en el capítulo 4, en este capítulo se aplica este enfoque para explorar el comportamiento de las DWs en nanoalambres ferromagnéticos de diámetro modulado, y para estudiar el efecto en la propagación de la DW debido a diferentes defectos en un nanoalambre. Cada subsección comienza con la descripción del sistema y de las condiciones de estudio, seguido de los resultados; la metodología computacional y su validación se presentan en el capítulo 4.

5.1. Nanoalambres Modulados

La elección de nanoalambres con diámetro modulado se motiva por la posibilidad de estudiar de manera controlada cómo las constricciones y expansiones geométricas afectan la propagación de paredes de dominio. Las variaciones de diámetro generan potenciales energéticos locales que influyen en la dinámica de la DW, un fenómeno relevante para aplicaciones en dispositivos magnéticos de almacenamiento y lógica magnética. Además, estas estructuras son realizables experimentalmente y han sido ampliamente investigadas recientemente, lo que las convierte en un sistema representativo

para explorar el efecto de geometrías no uniformes en la dinámica de paredes de dominio (Fernández-Roldán et al., 2019; Bran et al., 2023).

Para explorar el comportamiento de las DWs en nanoalambres ferromagnéticos de diámetro modulado, se considera un sistema como el que se muestra representado esquemáticamente en la Fig. 5.1, los cuales son fácilmente obtenibles y pueden ser estudiados en la actualidad. El nanoalambre modulado se caracteriza por cuatro escalas longitudinales: los diámetros D y D_f que representan las partes más delgadas y más gruesas, respectivamente, y por las longitudes L y L_f que representan la longitud total del nanoalambre y la longitud de la parte más delgada, respectivamente. Los sistemas que se estudian aquí se caracterizarán por las relaciones de aspecto $D_f/D = 1.0, 1.7, 2.7$ y 3.3 y se considerará $L_f = L/2$. Los diámetros considerados ($D = 60$ nm) con las diferentes relaciones de aspecto son mucho mayores que la longitud de intercambio del hierro ($l_{ex} \approx 4.8$ nm), lo que garantiza que la dinámica de las paredes de dominio esté dominada por la modulación geométrica del nanoalambre y no por efectos de intercambio locales.

Antes de explorar el comportamiento de los sistemas modulados, con el objetivo de tener un comportamiento con el cual comparar, primero se calcula el movimiento de la DW en nanoalambres no modulados, con diámetro $D = 60$ nm, y se estudia el efecto del tamaño utilizando diferentes longitudes $L = 1000, 1500, 2000$ y 2500 nm. Los resultados se muestran en la Fig. 5.2 en la que se presentan las curvas de la posición del centro de la DW en función del tiempo z_w vs t para las longitudes mencionadas en presencia de un campo de 0.4 T. En este caso el campo magnético se aplica sobre todo el sistema y, en consecuencia, se producen dos nucleaciones, una en cada extremo del cable, las cuales se mueven hacia el centro de la muestra. Para fines de visualización,

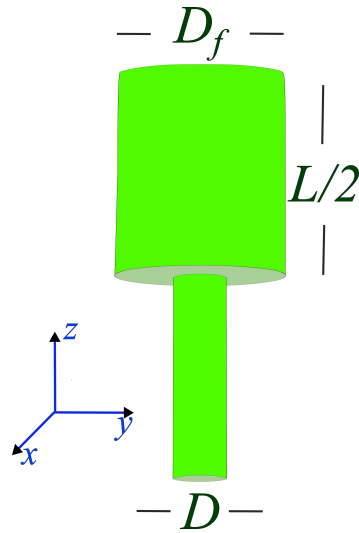


Figura 5.1. Vista esquemática de una muestra modulada típica y sus dimensiones. D y D_f son los diámetros de las partes más delgadas y más gruesas, respectivamente; y L es la longitud de todo el sistema modulado. Las muestras estudiadas se caracterizan por las relaciones de aspecto $D_f = D = 1.0, 1.7, 2.7$ y 3.3 .

el origen del sistema de coordenadas se ha trasladado para que coincida con el centro de los alambres.

Como se observa, se obtienen comportamientos cualitativamente similares para la propagación de las DWs que viajan desde ambos extremos del alambre, en las longitudes consideradas, paredes que viajan con una velocidad media de $v_m = 6.4 \times 10^3$ m/s. Estos resultados además evidencian la interacción entre los dos dominios magnéticos que paulatinamente se van formando a medida que las DWs se propagan, y que apuntan en la dirección del campo magnético, la cual conduce a nuevas nucleaciones de la DW ubicadas en la región centro del alambre. Vale la pena señalar que cuanto mayor es la longitud del alambre, mayor es el número de nucleaciones obtenidas en la región central del alambre (más allá de aproximadamente 80 ps). Esta fenomenología está relacionada con el tamaño de los dominios magnéticos en cada uno de los extremos del nanoalambre

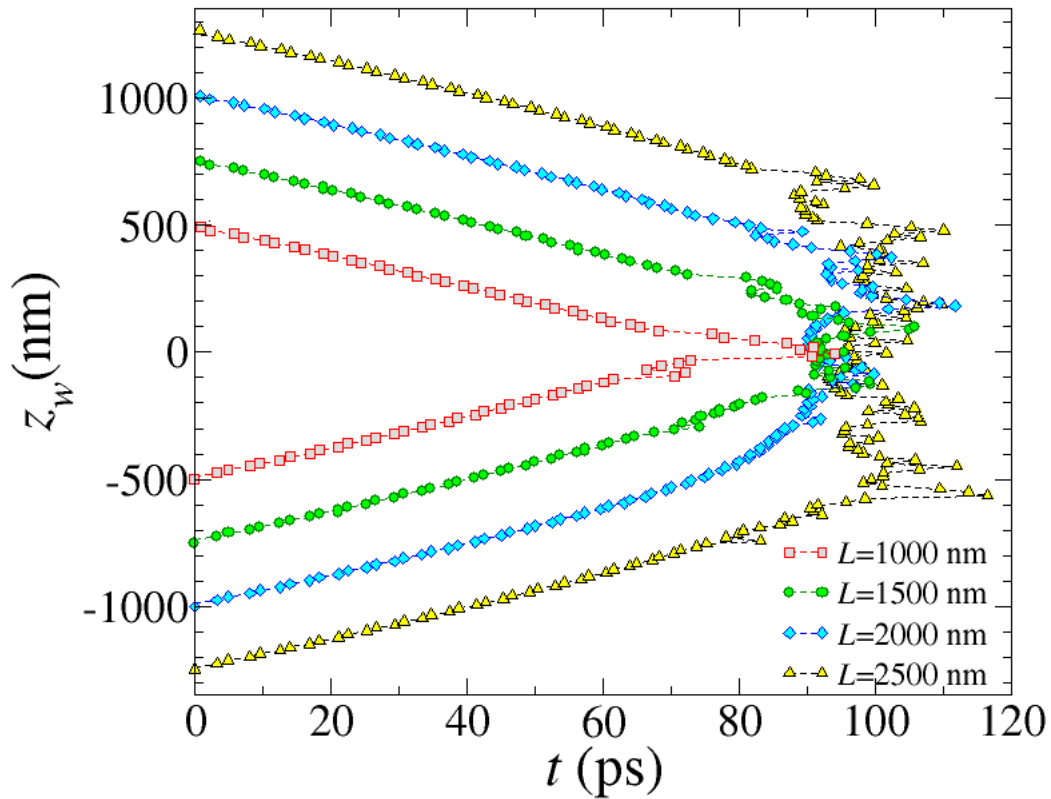


Figura 5.2. Posición de la DW en función del tiempo para nanoalambres de $D = 60$ nm y $L = 1000, 1500, 2000$ y 2500 nm, usando $\gamma = 0.0215$ y $H = 0.4$ T. En este caso el campo magnético se aplica sobre todo el sistema.

y con la competencia entre las energías de intercambio y dipolar. En este caso, se encuentra que el tamaño crítico en el que la energía dipolar entre dos dominios magnéticos es suficientemente grande como para competir con la interacción de intercambio local (interacción a primeros vecinos de un solo espín) es alrededor de 450 nm. Este valor se determinó observando las configuraciones de los dominios a $t \approx 80$ ps, combinado con la observación de que la velocidad de las paredes de dominio permanece lineal hasta ese tiempo, de manera independiente de la longitud del alambre. Por tanto, el tamaño crítico refleja efectivamente la influencia de la geometría y del tamaño de las paredes de dominio, y no depende de la longitud total del sistema.

En efecto, para el alambre con $L = 1000$ nm, cuando los dominios magnéticos ya invertidos en la dirección del campo magnético alcanzan el tamaño crítico de 450 nm, el dominio magnético que se encuentra entre ellos (todavía en dirección opuesta al campo) es de tamaño muy pequeño y está prácticamente ocupado por las dos DW que viajan hacia el centro. En estas condiciones no puede haber nuevas nucleaciones en esta pequeña región, alrededor del centro del alambre, como se observa en los resultados correspondientes a $L = 1000$ nm (línea roja) en la Fig. 5.2. Por el contrario, a medida que aumenta la longitud del alambre, el dominio magnético en dirección opuesta al campo que se encuentra entre las dos DWs, es lo suficientemente grande como para que se produzcan nuevas nucleaciones como efecto de la interacción dipolar con los dominios magnéticos dirigidos a lo largo del campo magnético.

En efecto, para el alambre con $L = 100$ nm, cuando los dominios magnéticos ya invertidos en la dirección del campo alcanzan el tamaño crítico de 450 nm, el dominio intermedio, aún orientado en dirección opuesta al campo, es muy pequeño y prácticamente ocupado por las dos DWs que se desplazan hacia el centro. En estas condiciones, no se producen nuevas nucleaciones en esta región central, como se observa en los resultados para $L = 100$ nm, (línea roja en la Fig. 5.2). Por el contrario, al aumentar la longitud del alambre, el dominio intermedio se vuelve lo suficientemente grande como para que la interacción dipolar con los dominios ya alineados induzca nuevas nucleaciones en la región central (como se observan también en la Fig. 5.2).

Ahora se considera el comportamiento de las DWs en nanoalambres de diámetro modulado como se muestra esquemáticamente en la Fig. 5.1. La Fig. 5.3 muestra los resultados para nanoalambres con $L = 1000$ nm y

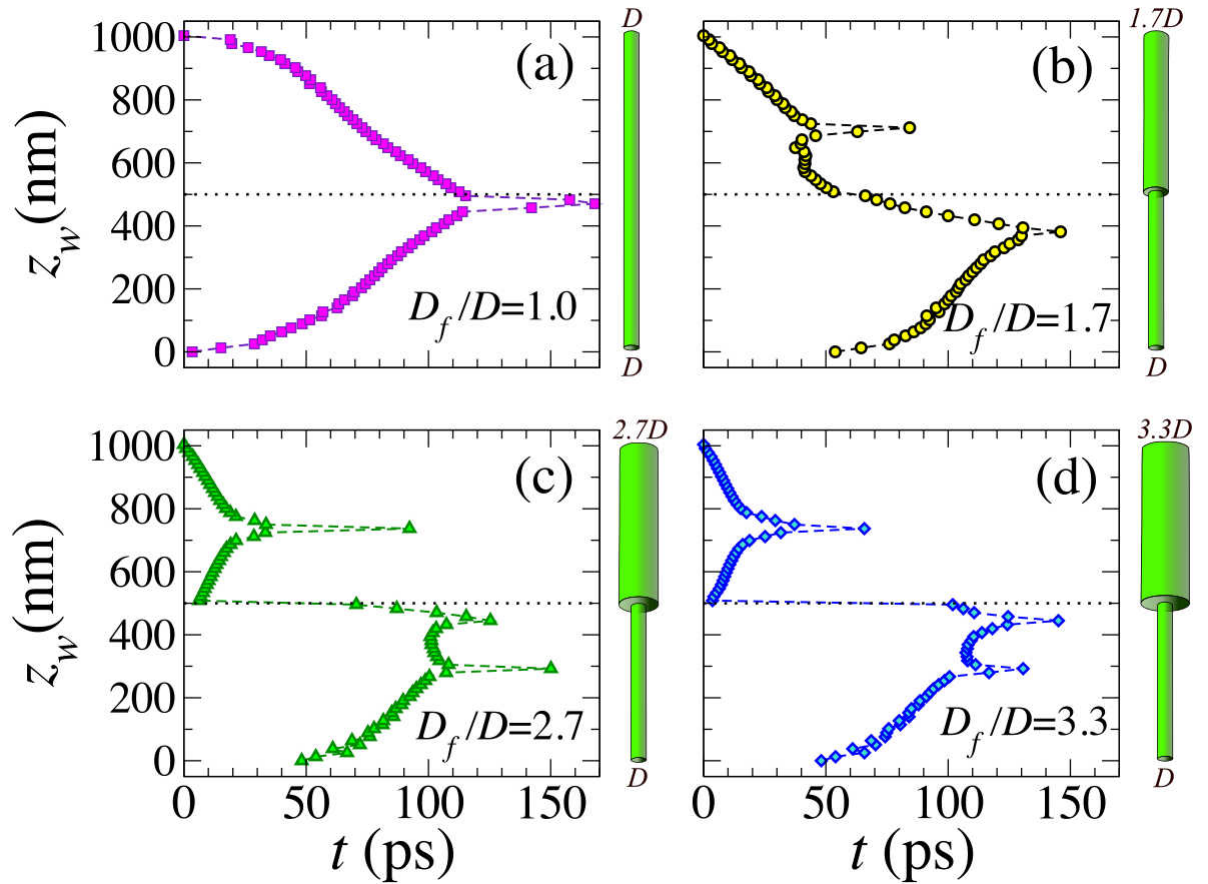


Figura 5.3. Posición de la DW en función del tiempo para nanoalambres de diámetro modulado con $L = 1000$, $D = 60$ nm y $D_f/D = 1.0$ (a), 1,7 (b), 2,7 (c) y 3,3 (d). Se han utilizado los valores $\gamma = 0,0215$ y $H = 0.2$ T. Las representaciones esquemáticas de las estructuras moduladas se muestran en verde en el lado derecho de cada gráfico.

varias relaciones de aspecto entre los diámetros externo e interno: $D_f/D = 1.0, 1.7, 2.7$ y 3.3 , para un campo magnético de $H = 0.2$ T aplicado a toda la muestra.

Para las modulaciones consideradas, la propagación de la primera DW comienza en el extremo más grueso ($t = 0$ ps) debido a los efectos combinados entre la energía de intercambio y la energía dipolar en una misma capa en los extremos, en concordancia con estudios previos sobre nanoalambres cilíndricos de diámetro modulado, donde se ha reportado una

nucleación preferencial de DWs en regiones de mayor diámetro (Fernández-Roldán et al., 2019; Altbir et al., 2020).

En efecto, la energía de intercambio en estas capas se reduce debido a la disminución en la coordinación, por el hecho de tener superficies libres, lo cual hace que se reduzca la barrera de energía que mantiene a un espín en una configuración FM con sus vecinos. Debido a la reducción de esta barrera de energía, los espines se organizan en una configuración antiferromagnética, la cual minimiza la energía dipolar en esta localidad (ver Anexo B.1). Este mecanismo ha sido ampliamente discutido en la literatura como el origen de la nucleación de paredes de dominio en superficies libres, independientemente del enfoque numérico empleado.

De esta manera, el hecho de que la nucleación inicie en la superficie más gruesa se debe a que existe una mayor probabilidad de que se produzca este mecanismo de nucleación debido a la mayor cantidad de espines en la superficie, lo que incrementa la contribución dipolar superficial, tal como se observa en simulaciones micromagnéticas de nanoalambres con diámetro modulado (Fernández-Roldán et al., 2019).

Además, la velocidad de propagación de las DWs en la parte más gruesa aumenta con el diámetro. Este comportamiento se correlaciona con el hecho de que, a mayor diámetro del alambre, mayor es el número de espines dentro de una determinada capa, lo que da lugar, a través de la interacción dipolar, a un mayor ordenamiento AF local. Este ordenamiento modifica la estructura interna efectiva de la DW, reduciendo el retardo dinámico y favoreciendo su desplazamiento bajo campo aplicado, en acuerdo con resultados previos que muestran una dependencia sistemática de la velocidad de la DW con la geometría del nanoalambre (Fernández-Roldán et al., 2019; Altbir et al., 2020). De hecho, las velocidades medias (velocidades

terminales) calculadas para el movimiento de la DW son $v = 4.15 \times 10^3$, 6.85×10^3 , 12.01×10^3 y 14.32×10^3 m/s para $D_f/D = 1.0$, 1.7, 2.7 y 3.3, respectivamente.

Por otro lado, en la Fig. 5.3a correspondiente a la relación de aspecto $D_f/D = 1.0$ (alambre no modulado), así como en el perfil del movimiento de la DW correspondiente a las partes más delgadas de las muestras (extremos inferiores), se observan comportamientos no lineales de las curvas z_w vs t , lo que indica que las DWs se aceleran inicialmente. Después de esta primera etapa acelerada se alcanza una velocidad constante (terminal) debido al régimen viscoso, como se ha discutido en la literatura (Slonczewski, 1972; Schryer and Walker, 1974). Vale la pena enfatizar que esta fuerza viscosa no tiene su origen en el término de Gilbert (amortiguación) que aparece en la ecuación de Landau-Liftshitz-Gilbert, sino que es intrínseca al Hamiltoniano del problema, ya que esta etapa acelerada también se obtiene en simulaciones de Monte Carlo, cuyo Hamiltoniano no incluye el término de amortiguamiento. Según nuestras observaciones, esta fuerza viscosa surge, principalmente, como resultado de la interacción dipolar, cuyo mínimo tiene lugar para un orden FM o AF dependiendo de la dirección relativa entre la línea que une los espines que interactúan y el eje del alambre. En efecto, para espines a lo largo de una línea perpendicular al plano se prefiere una configuración FM, mientras que para aquellos espines en la misma capa se prefiere un estado AF.

Un efecto de la modulación en el diámetro del nanoalambre es la introducción de un retraso en las nucleaciones de las DWs que viajan en la dirección $+z$ de los sistemas desde la interfaz y también se observa un retraso en el movimiento de las DWs en la dirección $-z$ (en la parte más delgada). Cuanto mayor sea la relación D_f/D , menor será el retardo relacionado.

Este efecto físico también se debe al hecho de que la energía dipolar se ve favorecida por aquellas configuraciones AF obtenidas a medida que aumenta el diámetro, como se discutió anteriormente. En otras palabras, como en la parte más gruesa los espines se dirigen en la dirección $+z$, en la interfaz aquellos espines que apuntan hacia abajo minimizan el término dipolar dado su estado AF, y, en consecuencia, se necesita mayor tiempo para que el movimiento descendente de la DW comience.

Como posible aplicación, debido al consiguiente retraso en el movimiento de las DWs, este tipo de configuraciones estructurales consistentes en un alambre delgado unido a otro grueso, geometría fácilmente alcanzable hoy en día, permitiría estudiar el movimiento de las DWs en un nanoalambre grande y delgado sin la necesidad de implementar una región de campo magnético nulo, lo que podría ser más difícil de implementar en los extremos muy pequeños de las muestras nanométricas de interés.

5.2. Efecto de defectos esféricos en la propagación de la pared de dominio

En materiales ferromagnéticos nanométricos, la presencia de defectos estructurales puede afectar de manera significativa la dinámica de las paredes de dominio, ya que estos actúan como pinning centers que modifican la velocidad y la estabilidad de su propagación. Comprender cómo la densidad y distribución de defectos influye en la dinámica de la DW es relevante tanto desde un punto de vista fundamental, para describir los mecanismos de fricción y retardo, como desde un punto de vista tecnológico, ya que los defectos inevitables en nanoalambres pueden impactar el desempeño de

dispositivos de almacenamiento o lógicos basados en DWs.

Como segundo ejemplo de la aplicación del método FASD, se estudia como afecta a la velocidad de propagación de la DW un porcentaje de defectos esféricos, los cuales se definen como una vacante en el sistema escalado. Más precisamente los defectos considerados aquí como vacancias son, en la muestra real, defectos esféricos de un cierto radio, como se muestra en la Fig. 5.4.

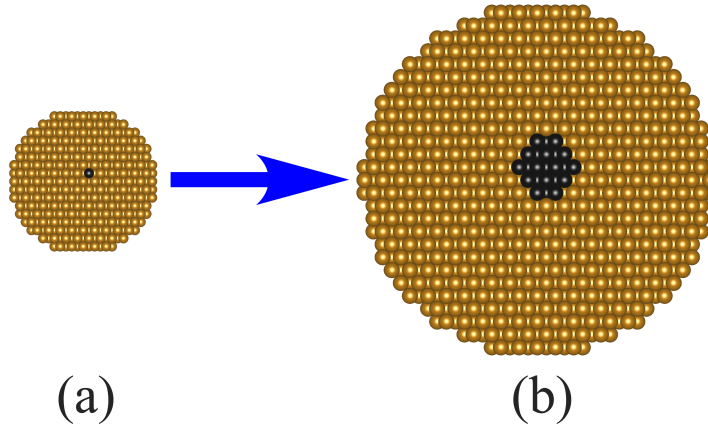


Figura 5.4. Representación de la vacancia en un sistema escalado (a), el cual al re-escalar hacia el sistema real (b) representa un defecto esférico.

El sistema consiste de un nanoalambre de longitud $L = 1000$ nm y $D = 30$ nm, con escalamiento dado por $\gamma = 0.03011$ a temperatura de 10 K. La estructura resultante consta de 151 capas, separadas por distancias de 1.98 \AA . Entonces, las vacancias en el sistema real serían esferas de aproximadamente 4 nm de radio.

Como estamos interesados en la propagación de la DW (y no en su nucleación), se generó una pared de dominio en las primeras 12 capas de uno de los extremos del nanoalambre. Esta configuración inicial se obtiene colocando los espines en sentido opuesto al campo magnético aplicado (0.4 T) y realizando una simulación hasta que se nuclea y propaga una pared

de dominio completa dentro del nanoalambre. La configuración inicial es totalmente física y representa un estado estable de la DW bajo las condiciones del campo aplicado. De esta manera, se evita el tiempo de cálculo requerido para la nucleación espontánea, que no aporta información adicional sobre la propagación, y se asegura que solo se propaga esta pared inicial, evitando la aparición de múltiples paredes y comportamientos no físicos asociados a discontinuidades en el campo magnético. Se espera que la propagación se limite a una sola pared, considerando que la nucleación espontánea de otra DW tomaría un tiempo mayor que el tiempo de propagación de la DW desde el extremo inicial.

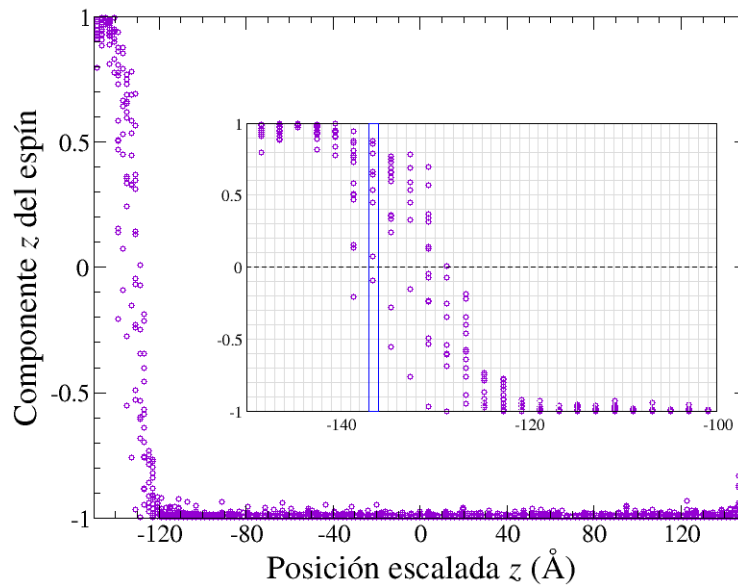


Figura 5.5. Componente z de los espines en la parte inferior del nanoalambre que representa la DW inicial. El inset muestra un zoom de la DW. El cuadro azul indica el centro de la DW.

La pared inicial, que se utiliza en las diferentes concentraciones de vacancias, se muestra en la Fig. 5.5. En esta figura, se ha graficado el valor de la componente z de cada uno de los espines del sistema, de tal manera que cada línea vertical representa una capa del nanoalambre. Como se observa,

los espines de las primeras capas ya se encuentran invertidas en la dirección z positiva, y el centro de la pared de dominio definido como la capa donde la componente z de la magnetización cambia de signo, está marcado por el cuadro azul en el recuadro de la figura, y corresponde a la séptima capa. Esta capa se toma como el tiempo inicial de la propagación de la pared de dominio.

La Fig. 5.6 muestra una imagen tridimensional de los espines que se considera como configuración inicial, en la que se observa la pared de dominio. Las componentes z de estos espines son las que realmente se muestran en la Fig. 5.5.

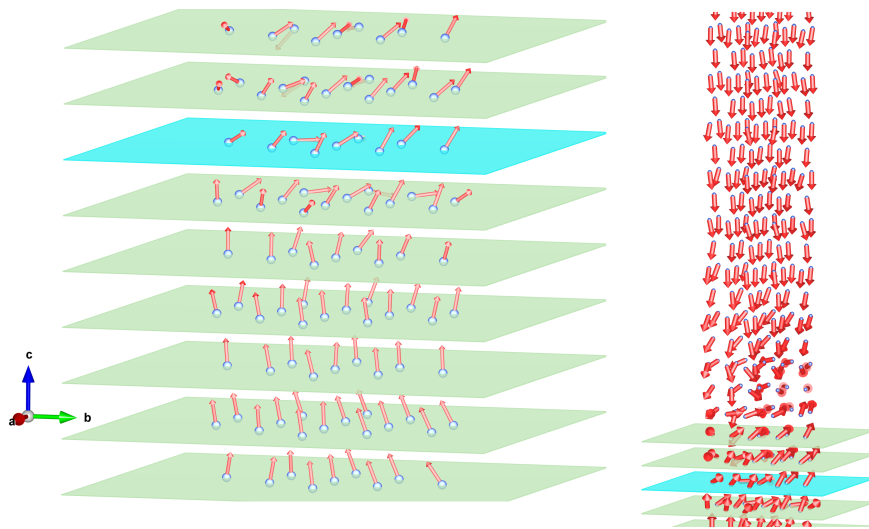


Figura 5.6. Representación 3D de la configuración inicial de la pared de Dominio a $T = 10$ K. En el lado izquierdo se muestra las 9 primeras capas. En el plano de color celeste se encuentra el centro de la pared

Las vacancias se ponen en forma aleatoria con un cierto porcentaje p , y se realiza el cálculo de la propagación de la DW con 5 semillas diferentes, todas con la misma configuración de defectos. Para comprobar que la distribución de las vacancias no afectan los resultados de la rapidez de la DW, se realiza 10 diferentes distribuciones aleatorias y se realiza el cálculo con la misma semilla. La rapidez media de la pared se calcula mediante el

ajuste lineal del resultado de cada semilla y luego se promedia sobre ellos, de esta manera se obtiene también el error estadístico en el valor de la rapidez de la DW. El campo magnético se deja fijo a 0.4 T.

La Fig. 5.7 muestra la propagación del centro de la DW para el caso del nanoalambre con 1.0% de vacancias para una misma distribución de vacancias en el sistema y diferentes semillas en el cálculo de la dinámica (Fig. 5.7a) y para diferentes distribuciones de las vacancias, utilizando la misma semilla en la dinámica (Fig. 5.7b). Se puede observar que la distribución de las vacancias no afecta a la velocidad de propagación. La rapidez media calculada para este caso es de $v = 2100 \pm 7$ m/s que comparada con la velocidad de propagación del mismo sistema pero sin defectos (2107 ± 3 m/s) es casi igual (0.3% de diferencia).

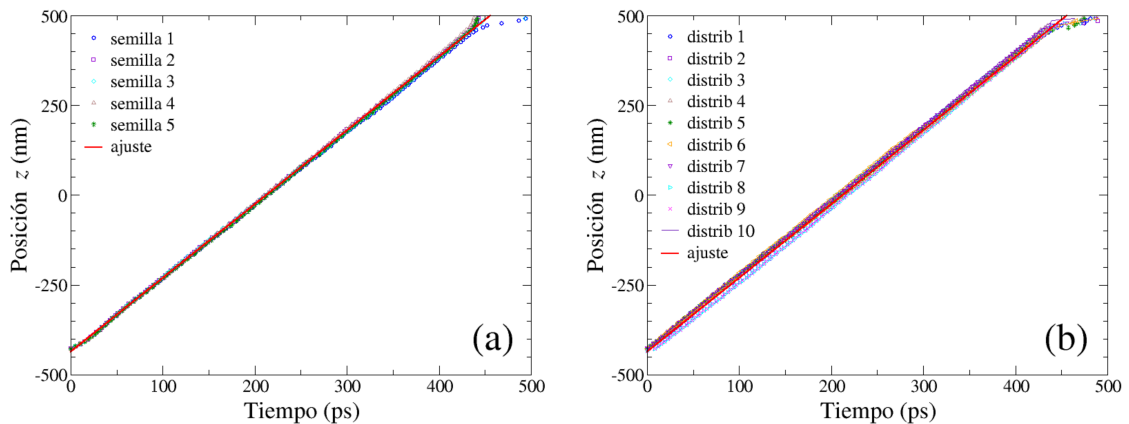


Figura 5.7. Propagación del centro de la DW para 1.0% de vacancias. (a) Igual distribución de defectos y diferentes semillas en el cálculo de la dinámica. (b) Igual valor de la semilla en el cálculo de la dinámica con diferentes distribuciones de defectos. El ajuste lineal es el mismo en ambos casos.

El comportamiento de la rapidez media de la DW como función del número de vacancias se muestra en la Fig. 5.8. Se observa, en general, que la rapidez de la DW disminuye con el aumento de vacancias, i.e., estos defectos esféricos tienden a frenar el movimiento de la pared. En la gráfica

se nota un aumento progresivo del tamaño de las barras de error a partir de concentraciones de vacancias del orden del 4%. Estos cambios se deben a variaciones en la rapidez instantánea de la DW cuando ésta alcanza zonas de mayor concentración de defectos, donde la pared experimenta eventos locales de pinning y depinning. En estas regiones, la DW puede detenerse temporalmente, desplazando la curva $z(t)$ en diferentes posiciones a lo largo del alambre, dependiendo de la distribución aleatoria de las vacancias. En consecuencia, al realizar el ajuste lineal para calcular la rapidez media, la pendiente presenta una distribución estadística cuya dispersión aumenta con la concentración de vacancias, lo que da lugar a un mayor error estadístico sin implicar un cambio cualitativo en el mecanismo de propagación de la DW.

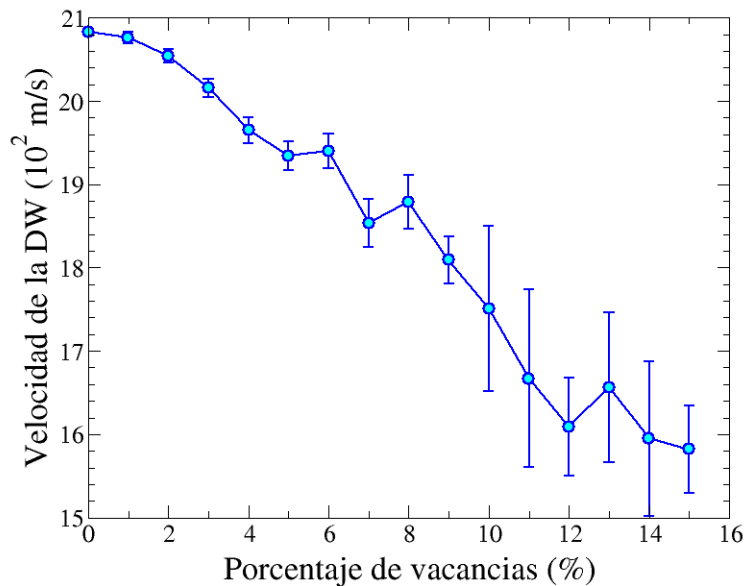


Figura 5.8. Velocidad media de la propagación de la pared de dominio como función del porcentaje de vacancias para un nanoalambre de 1000 nm de longitud, 30 nm de diámetro y un campo aplicado de 0.4 T. El radio de los defectos esféricos (las vacancias) es de 4 nm.

La Fig. 5.9 muestra la propagación de la DW en un nanoalambre con $p = 4\%$ de vacancias, en el que se observa la retención de la DW en una

posición escalada de $\approx -50 \text{ \AA}$ durante un intervalo de tiempo de ≈ 90 ps. Se analiza el sistema escalado porque este es solo un ejemplo de una distribución de vacancias, y por tanto la posición y el tiempo de retención (que como el tiempo no escala es el mismo en el sistema real) no tienen importancia porque va a variar en cada caso. En esta figura se representa la cantidad de vacancias en cada capa con diferente símbolo y color para vacancias entre 0 y 3. En las capas 53 y 74 ubicadas en -45.54 \AA y -3.96 \AA , respectivamente, se obtiene el máximo valor de vacancias. Sin embargo, su distribución es diferente tal como se muestra en los recuadros de la Fig. 5.9. Los recuadros insertados en la Fig. 5.9 muestran una porción del alambre ubicados en la posición señalada. Acá las esferas de color negro corresponden a las vacancias, mientras que las de color amarillo a los puntos de red. En el recuadro de la izquierda se puede observar una acumulación de vacancias, llegando incluso a que varias de ellas se encuentren conectadas. Esta acumulación da lugar a un defecto efectivo de mayor tamaño, el cual constituye un obstáculo más significativo para la propagación de la DW. En contraste, una acumulación menor de vacancias produce un impedimento más débil al movimiento de la pared, como se observa en el recuadro de la derecha. Como se aprecia en la figura, la acumulación de vacancias puede incluso provocar que la DW se detenga temporalmente durante su propagación.

A partir de los 7-8 % de vacancias se observa una nucleación de pared en el otro extremo (extremo superior) del nanoalambre, para algunas distribuciones, como se muestra en la Fig. 5.10. Esto es debido a que la probabilidad de encontrar una vacancia en la última capa del nanoalambre aumenta, y la presencia de vacancias favorece a la nucleación de una pared porque disminuye la coordinación de primeros vecinos, y por tanto disminuye la barrera de energía que impone la interacción de intercambio para evitar que

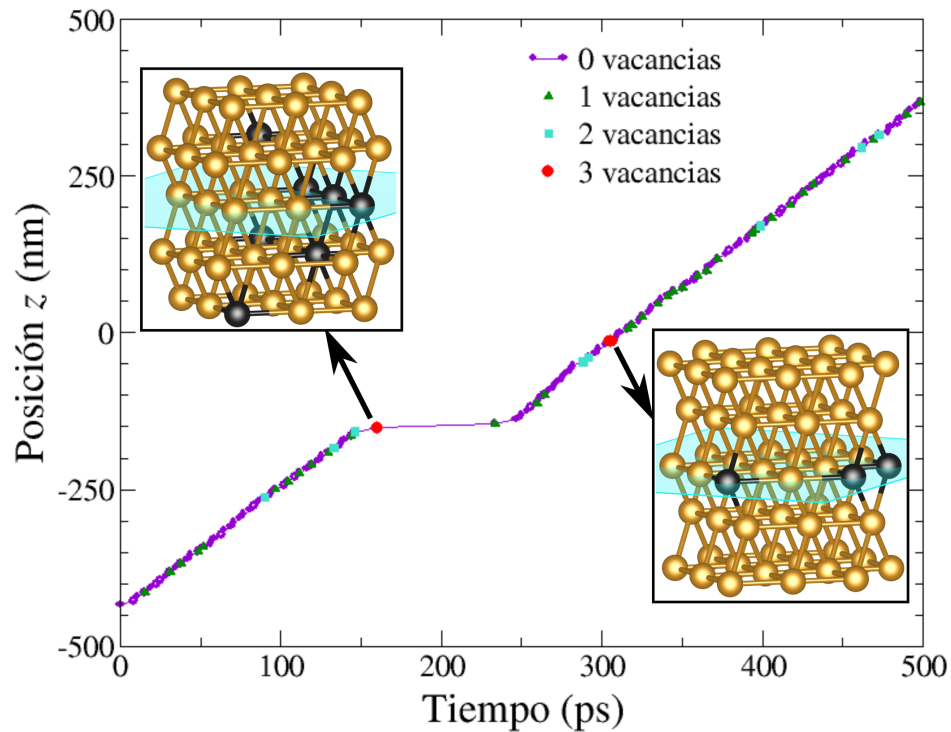


Figura 5.9. Propagación de la DW para 4 % de vacancias en el que se observa una retención de la DW debido a una alta concentración de vacancias en una de las capas del nanoalambre. En los recuadros, las esferas negras representan las vacancias, y las esferas amarillas los sitios de red.

un espín salga de la configuración FM. Las nucleaciones en el otro extremo son más rápidas mientras mayor es la cantidad de vacancias en esa zona.

Para un porcentaje de vacancias $p \geq 20\%$ se observa la existencia de múltiples nucleaciones, como se muestra en la Fig. 5.11a, y los nanoalambres con $p \geq 50\%$ están gobernados por múltiples nucleaciones por la gran cantidad de vacancias que aparecen en toda la estructura (Fig. 5.11b).

La interacción entre defectos (incluidas vacancias o irregularidades) y paredes de dominio, y su efecto sobre la dinámica de propagación han sido estudiados recientemente desde distintas perspectivas. En estructuras tridimensionales, se ha observado directamente cómo las DW interactúan con paisajes energéticos locales en nanocables y nanowires, evidenciando

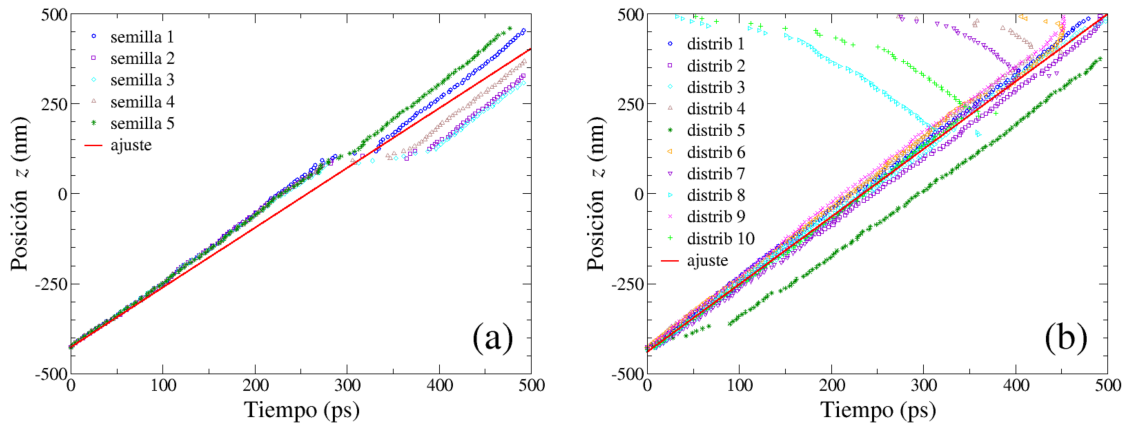


Figura 5.10. Propagación del centro de la DW para 8.0% de vacancias. (a) Igual distribución de defectos y diferentes semillas en el cálculo de la dinámica. (b) Igual valor de la semilla en el cálculo de la dinámica con diferentes distribuciones de defectos.

procesos de pinning y depinning en presencia de defectos o curvaturas geométricas que alteran la energía local de la pared (Askey et al., 2024). Estudios micromagnéticos también muestran que la presencia de desorden en nanowires o rugosidad en bordes conduce a configuraciones de pinned DWs y a una dinámica compleja no periódica, asociada a la transición entre modos de pared y a la influencia de sitios de pinning distribuidos aleatoriamente (Hayward, 2015). Además, investigaciones recientes exploran formalmente el papel de la pinning en sistemas acoplados y en la dinámica bajo diferentes condiciones de torques y campos, subrayando la importancia del paisaje de pinning en la movilidad de DWs en nanoestructuras magnéticas (Mallick et al., 2025). Por otro lado, estudios recientes sobre pinning de paredes por defectos puntuales en materiales ferroelectricos muestran cómo el desorden local actúa como centro de pinning en la dinámica de la pared, un concepto estrechamente relacionado con los mecanismos observados en sistemas magnéticos a escala atómica (Bulanadi et al., 2024). En este contexto, el enfoque atomístico discreto con técnica de escalamiento utilizado en este trabajo complementa estos resultados, proporcionando una descripción

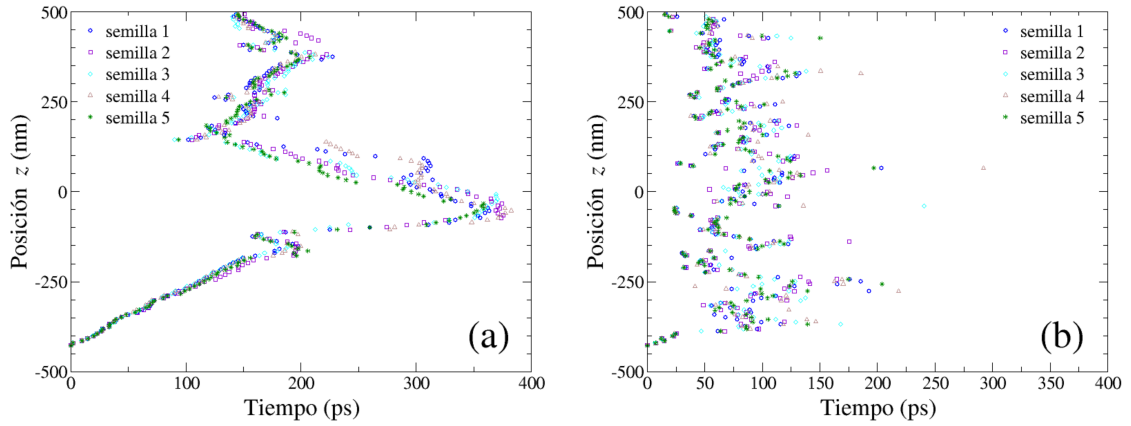


Figura 5.11. Propagación del centro de la DW para (a) 20 % de vacancias, (b) 50 % de vacancias.

detallada de cómo defectos a escala atómica afectan la propagación de las paredes de dominio.

5.3. Efecto de defectos cilíndricos extendidos en la propagación de la pared de dominio

Se considera ahora el efecto de un defecto cilíndrico extendido de longitud variable L_D y de diámetro variable D_D , concéntrico al nanoalambre de longitud $L = 1000$ nm y diámetro $D = 30$ nm, cuya geometría está esquematizada en la Fig. 5.12a. Al igual que en la sección 5.2, se usa un escalamiento de $\gamma = 0.03011$ a temperatura de 10 K, con la misma configuración inicial del nanoalambre sin defectos en equilibrio térmico. La idea es estudiar como cambia la rapidez promedio de la propagación de la DW en función de L_D y de esta manera investigar el comportamiento de la propagación de la pared cuando se hace una transición desde un nanoalambre a un nanotubo.

En la geometría escalada del nanoalambre bajo estudio, hay un total

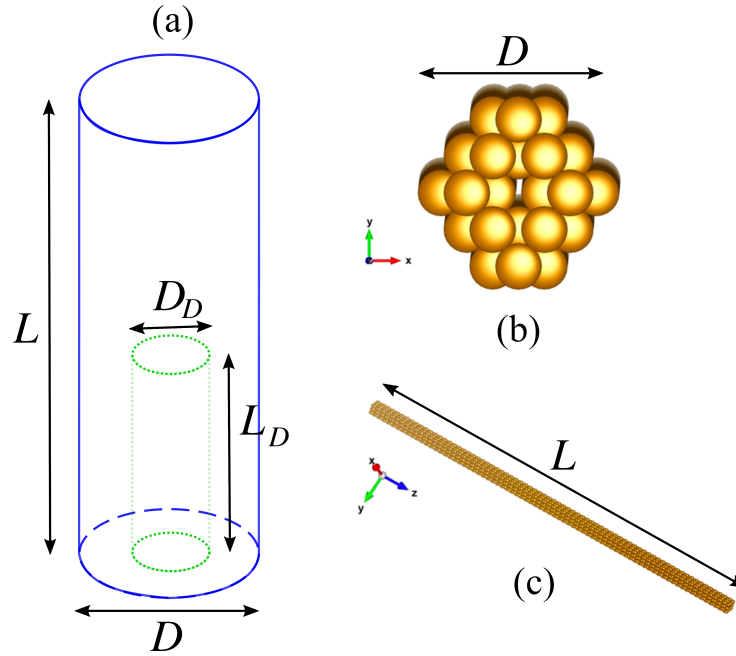


Figura 5.12. (a) Geometría del defecto extendido. (b) y (c) vista superior y lateral del sistema escalado con un defecto extendido.

de 151 capas separadas por distancias de $d = 1.98 \text{ \AA}$. Entonces, existen 150 separaciones entre capas, luego para obtener un gráfico con 10 puntos se puede considerar $150/10 = 15$ separaciones, es decir tomar defectos de longitud escalada L'_D que sean múltiplos de $15d = 29.70 \text{ \AA}$. De esta manera, la primera capa se encuentra ubicada en la coordenada $z = -148.49 \text{ \AA}$ y la distancia desde el eje de simetría del nanoalambre a los espines más cercanos (i.e., el radio más pequeño del defecto cilíndrico) es de 2.42 \AA . En la segunda capa, esta distancia es de 1.4 \AA ; las otras capas van alternándose. Luego, los radios que se pueden tomar en nuestro sistema escalado son de $2.42, 2.80, 3.96 \text{ \AA}$ para la primera capa y de $1.40, 1.98, 3.43, 4.20 \text{ \AA}$ para la segunda capa, y que corresponden a los vecinos más cercanos a un espín centrado en la capa. Por lo tanto, para mantener un shell cerrado como se muestra en la Fig. 5.12b, los radios que se puede utilizar serían $1.40, 1.98$ y 2.43 \AA correspondientes a diámetros en la estructura real de $D_D = 9.4, 13.3$

y 18.8 nm.

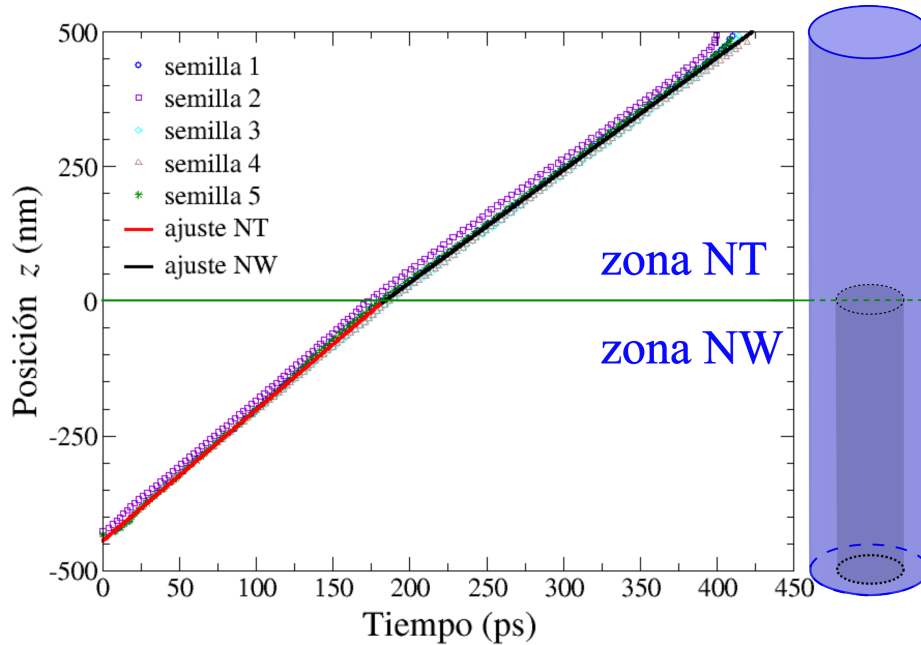


Figura 5.13. Propagación de la DW para 5 distintos valores de la semilla de un defecto cilíndrico concéntrico de dimensiones $L_D = 500$ nm y $D_D = 9.4$ nm. La línea roja es un ajuste lineal promediado en las 5 semillas en la zona del nanoalambre que tiene el defecto cilíndrico (ajuste NT), y la línea negra el correspondiente a la zona sin el defecto (ajuste NW).

La Fig. 5.13 muestra el resultado de la propagación de DW para el caso de un defecto cilíndrico de dimensiones $L_D = 500$ nm y $D_D = 9.4$ nm, que muestra las características principales obtenidas para $L_D < 1000$ nm. Primero, se nota que el sistema consta de dos partes: una zona con el defecto, que en nuestra geometría se encuentra en la parte inferior del sistema, a la cual se va a denominar zona de nanotubo (zona NT); y otra zona en el que está ausente el defecto, la cual se llamará zona de nanoalambre (zona NW). Entonces, se observa que la rapidez media de la propagación de la DW zona NT, de presencia del defecto, aumenta con respecto a la zona sin defecto NW. Esto se puede entender considerando que en la zona de defecto extendido hay una disminución uniforme de la coordinación a primeros vecinos y por

lo tanto facilita la propagación de la DW.

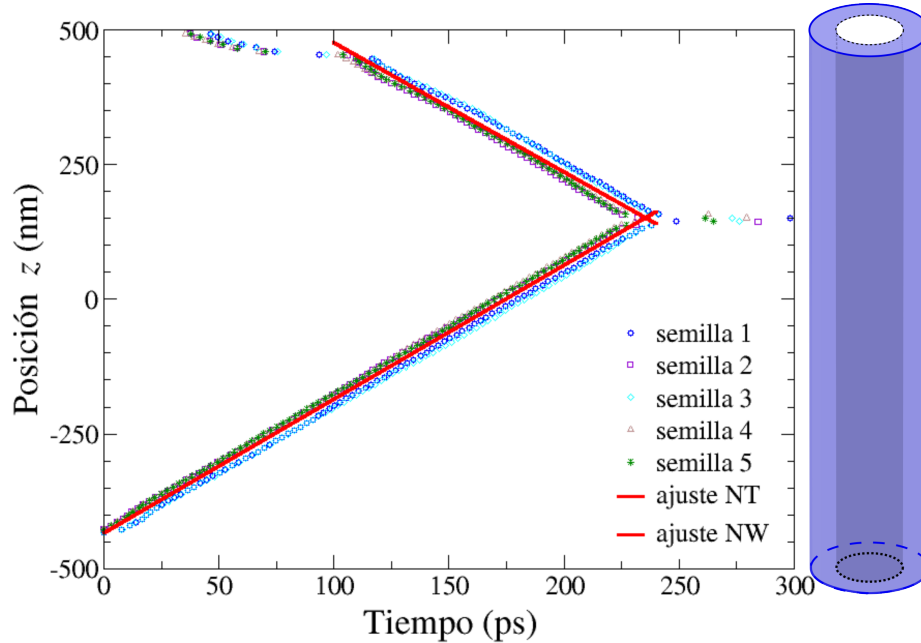


Figura 5.14. Propagación de la DW para un nanotubo ($L_D = L = 1000$ nm) de diámetro interno $D_D = 9.4$ nm. La línea roja es un ajuste lineal promediado en las 5 semillas.

En el caso en que $L_D = L$ se obtiene un nanotubo, y la disminución de espines en el otro extremo facilita la nucleación de una nueva pared de dominio, la cual se propaga hacia abajo, como se muestra en la Fig. 5.14. Hay que recordar que inicialmente se creó una DW en el extremo inferior del alambre y por esta razón se ve en la Fig. 5.14 que la propagación empieza primero en este extremo.

En la Fig. 5.15 se muestra la rapidez de la propagación de la DW para el defecto cilíndrico de diámetro $D_D = 9.4$ nm, en función de la longitud del defecto L_D . Se puede observar que la velocidad de propagación en cada zona es prácticamente independiente de la longitud L_D del defecto, y el único efecto es el cambio del valor de la rapidez en las dos zonas.

Al aumentar el diámetro D_D del defecto, se observa la nucleación de nuevas paredes de dominio en la zona NT, cerca de la transición NT–NW.

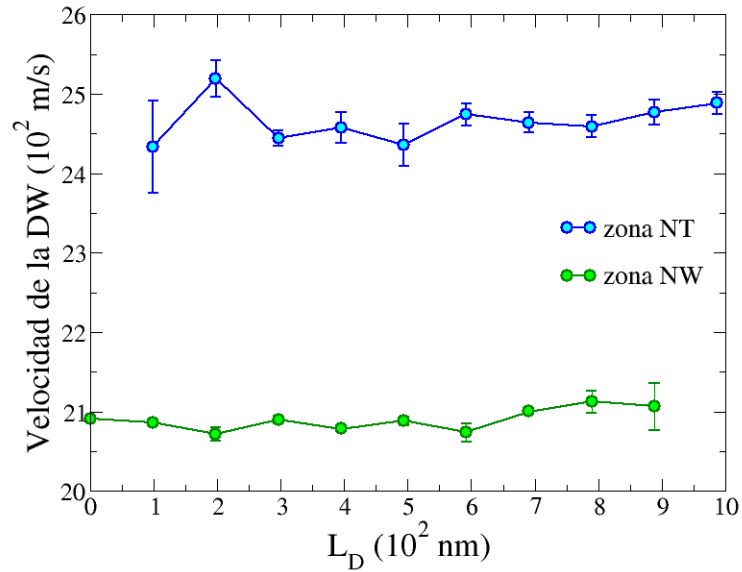


Figura 5.15. Rapidez de la propagación de la DW para un defecto cilíndrico de diámetro $D_D = 9.4$ nm, en función de la longitud del defecto L_D , en presencia de un campo magnético $B = 0.4$ T.

Esto se evidencia en las Figs. 5.16a y 5.16b, correspondientes a $D_D = 13.3$ y 18.8 nm, donde las curvas $z(t)$ muestran saltos adicionales que representan la aparición de nuevas DWs. La presencia de estos saltos indica que la probabilidad de nucleación aumenta con el diámetro interno del nanotubo, de modo que mayores valores de D_D facilitan la formación de múltiples paredes en la región de transición y afectan la dinámica global de propagación.

Finalmente, si se compara la rapidez promedio de propagación de los diferentes diámetros D_D estudiados aquí (ver Fig. 5.17), se puede apreciar que esta rapidez también aumenta con el incremento del diámetro del defecto.

Finalmente, se compara la rapidez promedio de propagación de las paredes de dominio para los diferentes diámetros D_D estudiados (Fig. 5.17). Todas las simulaciones se realizaron bajo un campo fijo de 0.4 T, garantizando que la dinámica se encuentra por encima del umbral de Walker. Por lo tanto, los incrementos observados en la rapidez promedio al aumentar

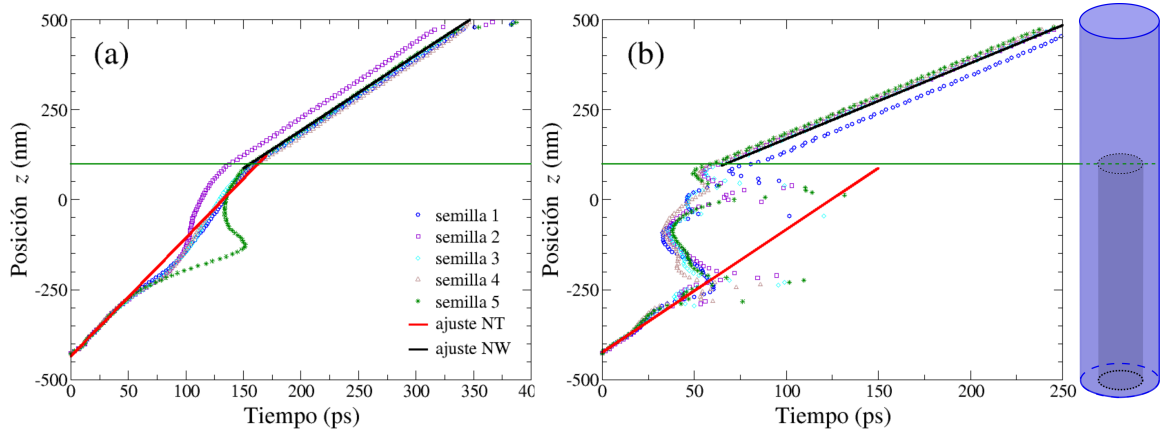


Figura 5.16. Propagación de la pared de dominio para un defecto cilíndrico concéntrico de dimensiones $L_D = 500$ nm con (a) $D_D = 13.3$ nm, y (b) $D_D = 18.8$ nm. Las líneas rojas son un ajuste lineal promediado en las 5 semillas en la zona del nanowire que tiene el defecto cilíndrico (ajuste NT), y las líneas negras las correspondientes a la zona sin el defecto (ajuste NW)

D_D no corresponden a un cambio del régimen dinámico, sino que reflejan exclusivamente los efectos geométricos del diámetro del defecto. La Fig. 5.17 muestra claramente esta tendencia: para cada valor de L_D , la velocidad media en la zona del defecto (NT) aumenta sistemáticamente con D_D . Esto se debe a que un mayor diámetro implica una disminución más uniforme de la coordinación de primeros vecinos en la región del nanotubo, facilitando la propagación de la DW y, en algunos casos, favoreciendo la nucleación de nuevas paredes cerca de la transición NT–NW. Las líneas de ajuste en la figura representan los valores promedio sobre cinco semillas diferentes, mientras que las barras de error reflejan la dispersión estadística debida a la distribución aleatoria de los espines iniciales.

En conjunto, los resultados presentados en las Figs. 5.13–5.17 muestran de manera consistente cómo la presencia de defectos cilíndricos afecta la propagación de la DW. La comparación entre las zonas con defecto (NT) y sin defecto (NW) evidencia que la rapidez promedio de la DW en la

zona NT aumenta sistemáticamente con el diámetro interno D_D , mientras que la rapidez en la zona NW se mantiene prácticamente constante para cada longitud L_D del defecto. Este comportamiento refleja el efecto de la disminución de coordinación de primeros vecinos en la zona NT, que reduce la barrera de intercambio y la fricción dinámica local, facilitando el desplazamiento de la pared. Además, al incrementar D_D , se observa una mayor probabilidad de nucleación de nuevas paredes de dominio cerca de la transición NT–NW (Figs. 5.16a y 5.16b), lo que indica que la geometría del defecto amplifica las regiones donde el ordenamiento local favorece la formación de nuevas DWs. Cabe destacar que todas las simulaciones se realizaron bajo un campo magnético constante de 0.4 T, por lo que la aparición de nucleaciones adicionales no se asocia a un cambio de régimen dinámico, sino que responde exclusivamente al aumento del diámetro del defecto y a su efecto sobre la coordinación de espines. En síntesis, los resultados muestran una relación clara entre el diámetro del defecto, la rapidez de propagación de la DW y la probabilidad de nucleación de nuevas paredes, permitiendo interpretar de manera coherente los efectos geométricos de los defectos extendidos sobre la dinámica de las paredes de dominio en nanoestructuras magnéticas.

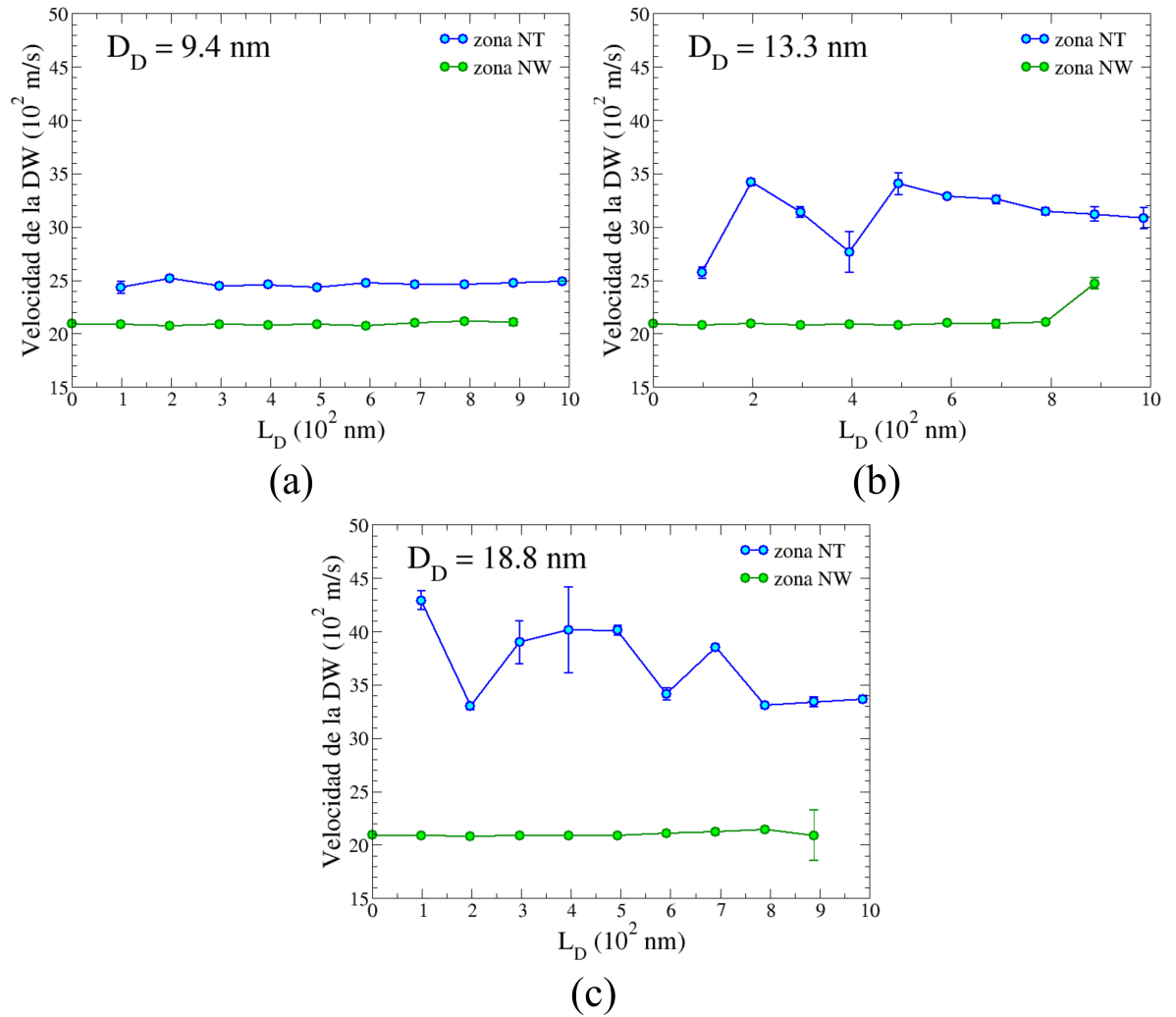


Figura 5.17. Comparación de la rapidez de la propagación de la pared de dominio, para defectos cilíndricos de diferente diámetro, en función de la longitud del defecto L_D . (a) $D_D = 9.4$ nm, (b) $D_D = 13.3$ nm, y (c) $D_D = 18.8$ nm.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

En el presente trabajo de tesis, se ha propuesto una metodología innovadora que combina las conocidas ventajas del poderoso enfoque de Dinámica de Espines (SD, por sus siglas en inglés) con la técnica de escalamiento energético y dimensional, dando lugar a un nuevo enfoque denominado “Dinámica de Espines Acelerada” (FASD). Esta combinación ha demostrado ser una herramienta eficiente para estudiar fenómenos magnéticos dependientes del tiempo en estructuras nanométricas, permitiendo realizar simulaciones de alta precisión en sistemas con un gran número de átomos, en tiempos significativamente reducidos en comparación con el enfoque clásico de SD.

El desarrollo de este enfoque se ha basado en la representación del tiempo dentro de la técnica de escalamiento energético y dimensional, lo que ha permitido integrar con éxito ambos métodos. Los resultados obtenidos muestran que el exponente de escala para el tiempo dentro de esta técnica es 0, lo que implica que el tiempo escalado en las simulaciones corresponde al tiempo real. Este hallazgo ha sido crucial, ya que garantiza que los resultados obtenidos mediante el FASD son cuantitativos y reflejan con precisión la evolución temporal de los sistemas magnéticos. Así, el enfoque FASD

permite la simulación de fenómenos magnéticos dependientes del tiempo en muestras de materiales con un elevado número de componentes atómicos del orden de millones de espines, superando la limitación temporal de los métodos clásicos y abriendo la puerta a la simulación de sistemas mucho más grandes y complejos.

La metodología FASD ha sido probada y validada mediante comparaciones con simulaciones micromagnéticas, específicamente aplicadas al fenómeno del movimiento de la pared de dominio (DW), que es un fenómeno magnético bien conocido y ampliamente estudiado en la física del magnetismo. Para estas comparaciones, se utilizaron simulaciones implementadas en el software mumax³, un enfoque micromagnético bien establecido. Los resultados mostraron que el FASD puede replicar de manera precisa los resultados obtenidos con las simulaciones micromagnéticas tradicionales, pero con un tiempo de simulación considerablemente reducido, del orden de horas, lo que demuestra la fiabilidad y eficiencia de este nuevo enfoque.

Una vez validada la técnica FASD, se procedió a su aplicación en el estudio del movimiento de las paredes de dominio en nanoalambres ferromagnéticos con modulación de diámetro, un sistema de gran interés tanto para la investigación fundamental como para aplicaciones tecnológicas actuales. Los resultados obtenidos revelaron efectos interesantes sobre cómo la modulación del diámetro de los nanoalambres afecta la dinámica de las paredes de dominio. Se observó que un efecto notable de la modulación es la introducción de un retraso en la nucleación de las paredes de dominio en la dirección $+z$ desde la interfaz (en la parte más gruesa del sistema), así como también un retraso en el movimiento de las paredes de dominio en la dirección $-z$ (en la parte más delgada del sistema). Este fenómeno se

relaciona con la influencia de la energía dipolar, que favorece configuraciones antiferromagnéticas a medida que el diámetro del sistema aumenta, y a la disminución de la barrera de energía de intercambio por la disminución de la coordinación en las superficies. Se observó también que, en sistemas con una mayor relación entre el diámetro más grueso (D_f) y el diámetro más delgado (D), el retardo en el movimiento de la DW disminuía. Estos hallazgos abren nuevas perspectivas para el diseño de materiales magnéticos modulares con propiedades controladas a nivel nanométrico, lo que es crucial para el desarrollo de tecnologías emergentes.

Además, se extendió el estudio a sistemas con defectos, donde los resultados revelaron interesantes comportamientos dinámicos de las paredes de dominio. Para defectos esféricos, los resultados obtenidos mostraron tres efectos clave relacionados con la propagación de la DW:

1. “Disminución de la velocidad de propagación”: En general, se observó que la rapidez de la DW disminuye con el aumento de vacancias, es decir, estos defectos esféricos tienden a frenar el movimiento de la DW. Este hallazgo indica que la presencia de vacancias esféricas introduce un obstáculo a la propagación de la pared, afectando la dinámica magnética del sistema.
2. “Dependencia de la rapidez de la DW con la concentración”: A medida que las vacancias se acumulan, se genera un defecto de mayor tamaño, lo cual se traduce en un obstáculo más grande para la propagación de la DW. Por otro lado, una acumulación menor de vacancias genera un menor impedimento en la propagación de la pared. Este comportamiento resalta la importancia de la densidad de defectos en la dinámica magnética.

3. “Múltiples nucleaciones en sistemas con altas vacancias”: Para un porcentaje de vacancias $p \geq 20 \%$, se observó la aparición de múltiples nucleaciones de paredes de dominio, y en los sistemas con $p \geq 50 \%$, las paredes de dominio estaban gobernadas por múltiples nucleaciones debido a la gran cantidad de vacancias que se generaban en toda la estructura. Este fenómeno podría ser aprovechado para controlar de manera precisa la nucleación y propagación de las paredes de dominio en dispositivos magnéticos, especialmente en aquellos sistemas que requieren un control fino de la estructura y las propiedades magnéticas.

En cuanto a los defectos cilíndricos, se encontró que la velocidad de propagación de la DW en estos sistemas es independiente de la longitud L_D del defecto, siendo el principal efecto observado un cambio en la rapidez de propagación entre las distintas zonas del sistema. Este resultado es particularmente relevante, ya que sugiere que los defectos cilíndricos no afectan de manera significativa la propagación de las paredes de dominio en términos de longitud, sino más bien en la velocidad con la que se propagan a través del sistema. Este fenómeno puede ser aprovechado para manipular la velocidad de propagación de las paredes de dominio en dispositivos magnéticos.

Otro hallazgo clave es que la probabilidad de nucleación de una DW aumenta con el incremento del diámetro del defecto cilíndrico, lo que sugiere que una mayor estructura interna favorece la estabilidad de la DW. Además, se observó que la rapidez promedio de propagación de la DW en nanotubos con defectos cilíndricos de diferentes diámetros también aumenta con el diámetro del defecto, lo que abre nuevas vías para el estudio de materiales defectuosos y sus aplicaciones en dispositivos de almacenamiento magnético de alta velocidad.

En resumen, este trabajo ha permitido el desarrollo de una herramienta altamente eficiente y precisa para la simulación de fenómenos magnéticos a nivel atómico. La combinación del enfoque de Dinámica de Espines con la técnica de Escalamiento en la metodología FASD ha permitido superar limitaciones computacionales significativas (en el modelo discreto), ofreciendo la capacidad de estudiar sistemas con un número elevado de átomos en tiempos mucho más reducidos que los métodos tradicionales. Los resultados obtenidos han proporcionado nuevas perspectivas sobre la influencia de la geometría y los defectos en la dinámica de las paredes de dominio, lo que tiene un potencial significativo para aplicaciones tecnológicas en el campo de la nanotecnología y los dispositivos magnéticos.

REFERENCIAS

- Aharoni, A. (2000). *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*, volume 109. Clarendon Press.
- Aharoni, A. and Shtrikman, S. (1958). Magnetization curve of the infinite cylinder. *Physical Review*, 109(5):1522.
- Al Bahri, M. and Al-Kamiyani, S. (2025). Improving domain wall thermal switching and dynamics in perpendicular magnetic anisotropy nanowire for reliable spintronic memory. *Nanomaterials*, 15(20):1552.
- Allende, S., Altbir, D., and Nielsch, K. (2009a). Magnetic cylindrical nanowires with single modulated diameter. *Physical Review B*, 80(17):174402.
- Allende, S., Escrig, J., Altbir, D., Salcedo, E., and Bahiana, M. (2008). Angular dependence of the transverse and vortex modes in magnetic nanotubes. *The European Physical Journal B*, 66(1):37–40.
- Allende, S., Escrig, J., Altbir, D., Salcedo, E., and Bahiana, M. (2009b). Asymmetric hysteresis loop in magnetostatic-biased multilayer nanowires. *Nanotechnology*, 20(44):445707.
- Allwood, D. A., Xiong, G., Faulkner, C. C., Atkinson, D., Petit, D., and Cowburn, R. P. (2005). Magnetic domain-wall logic. *Science*, 309(5741):1688–1692.
- Altbir, D., Fonseca, J. M., Chubykalo-Fesenko, O., Corona, R. M., Moreno, R., Carvalho-Santos, V. L., and Ivanov, Y. P. (2020). Tuning domain wall dynamics by shaping nanowires cross-sections. *Scientific Reports*, 10(1):21911.

REFERENCIAS

- Askey, J., Hunt, M. O., Payne, L., van den Berg, A., Pitsios, I., Hejazi, A., Langbein, W., and Ladak, S. (2024). Direct visualization of domain wall pinning in sub-100 nm 3d magnetic nanowires with cross-sectional curvature. *Nanoscale*, 16(38):17793–17803.
- Atkinson, D., Allwood, D. A., Xiong, G., Cooke, M. D., Faulkner, C. C., and Cowburn, R. P. (2003). Magnetic domain-wall dynamics in a submicrometre ferromagnetic structure. *Nature materials*, 2(2):85–87.
- Bahiana, M., Amaral, F., Allende, S., and Altbir, D. (2006). Reversal modes in arrays of interacting magnetic ni nanowires: Monte carlo simulations and scaling technique. *Physical Review B*, 74(17):174412.
- Baker Jr, G. (1996). Pr graves morris, padãe approximants. *Encyclopedia of Mathematics and its Applications, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge*.
- Bary'akhtar, V. G., Chetkin, M. V., A., I. B., and Gadetskii, S. N. (1994). *Dynamics of Topological Magnetic Solitons*. Springer Berlin, Heidelberg.
- Beach, G. S., Nistor, C., Knutson, C., Tsoi, M., and Erskine, J. L. (2005). Dynamics of field-driven domain-wall propagation in ferromagnetic nanowires. *Nature materials*, 4(10):741–744.
- Becker, R. and Döring, W. (1939). *Ferromagnetismus*. Springer.
- Bertotti, G. (1998). *Hysteresis in magnetism: for physicists, materials scientists, and engineers*. Gulf Professional Publishing.
- Bloch, F. (1932). Zur theorie des austausch problems und der remanenz erscheinung der ferromagnetika. *Z. Physik*, 74:295–807.
- Blundell, S. (2001). *Magnetism in condensed matter*. OUP Oxford.
- Bran, C., Fernández-Roldán, J. A., Moreno, J., Rodríguez, A. F., del Real, R. P., Asenjo, A., Saugar, E., Marqués-Marchán, J., Mohammed, H., Foerster, M., et al.

REFERENCIAS

- (2023). Domain wall propagation and pinning induced by current pulses in cylindrical modulated nanowires. *Nanoscale*, 15(18):8387–8394.
- Brown, W. (1963). *Micromagnetics*. Interscience.
- Brown Jr, W. F. (1940). Theory of the approach to magnetic saturation. *Physical Review*, 58(8):736.
- Brown Jr, W. F. (1941). The effect of dislocations on magnetization near saturation. *Physical Review*, 60(2):139.
- Brown Jr, W. F. (1957). Criterion for uniform micromagnetization. *Physical Review*, 105(5):1479.
- Brown Jr, W. F. (1959). Micromagnetics, domains, and resonance. *Journal of Applied Physics*, 30(4):S62–S69.
- Bulanadi, R., Cordero-Edwards, K., Tückmantel, P., Saremi, S., Morpurgo, G., Zhang, Q., Martin, L. W., Nagarajan, V., and Paruch, P. (2024). Interplay between point and extended defects and their effects on jerky domain-wall motion in ferroelectric thin films. *Physical Review Letters*, 133(10):106801.
- Burrowes, C., Vernier, N., Adam, J.-P., Herrera Diez, L., Garcia, K., Barisic, I., Agnus, G., Eimer, S., Kim, J.-V., Devolder, T., Lamperti, A., Mantovan, R., Ockert, B., Fullerton, E. E., and Ravelosona, D. (2013). Low depinning fields in Ta-CoFeB-MgO ultrathin films with perpendicular magnetic anisotropy. *Applied Physics Letters*, 103(18):182401.
- Caso, D., Tuero, P., García, J., Guslienko, K. Y., and Aliev, F. G. (2023). Dynamics and reversible control of the bloch-point vortex domain wall in short cylindrical magnetic nanowires. *Phys. Rev. Appl.*, 19:064030.
- Cayssol, F., Ravelosona, D., Chappert, C., Ferré, J., and Jamet, J. P. (2004). Domain wall creep in magnetic wires. *Phys. Rev. Lett.*, 92:107202.

REFERENCIAS

- Chermisi, M. and Muratov, C. B. (2013). One-dimensional néel walls under applied external fields. *Nonlinearity*, 26(11):2935.
- Corte-León, P., Gonzalez-Legarreta, L., Zhukova, V., Ipatov, M., Blanco, J., Churyukanova, M., Taskaev, S., and Zhukov, A. (2020). Controlling the domain wall dynamics in fe-, ni- and co-based magnetic microwires. *Journal of Alloys and Compounds*, 834:155170.
- d'Albuquerque e Castro, J., Altbir, D., Retamal, J. C., and Vargas, P. (2002). Scaling approach to the magnetic phase diagram of nanosized systems. *Physical Review Letters*, 88(23):237202.
- DeSimone, A., Kohn, R., Müller, S., and Otto, F. (2006). Recent analytical developments in micromagnetics. the science of hysteresis ii: Physical modeling, micromagnetics, and magnetization dynamics, g. bertotti and i. mayergoyz eds.
- Dirac, P. A. M. (1928). The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 117(778):610–624.
- Döring, L., Ignat, R., and Otto, F. (2014). A reduced model for domain walls in soft ferromagnetic films at the cross-over from symmetric to asymmetric wall types. *Journal of the European Mathematical Society (EMS Publishing)*, 16(7).
- Dullweber, A., Leimkuhler, B., and McLachlan, R. (1997). Symplectic splitting methods for rigid body molecular dynamics. *The Journal of chemical physics*, 107(15):5840–5851.
- Duranka, P., Onufer, J., and Ziman, J. (2018). Effect of temperature on domain wall dynamics in magnetic microwire. *AIP Conference Proceedings*, 1996(1):020008.
- Dzyaloshinskii, I. et al. (1957). Thermodynamic theory of weak ferromagnetism in antiferromagnetic substances. *Sov. Phys. JETP*, 5(6):1259–1272.
- Ellis, M. O. A., Evans, R. F. L., Ostler, T. A., Barker, J., Atxitia, U., Chubykalo-Fesenko,

REFERENCIAS

- O., and Chantrell, R. W. (2015). The Landau–Lifshitz equation in atomistic models. *Low Temperature Physics*, 41(9):705–712.
- Evans, R. F. L., Fan, W. J., Chureemart, P., Ostler, T. A., Ellis, M. O. A., and Chantrell, R. W. (2014). Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(10):103202.
- Exl, L., Suess, D., and Schrefl, T. (2020). Micromagnetism. *Handbook of Magnetism and Magnetic Materials*, pages 1–44.
- Feller, S. E., Zhang, Y., Pastor, R. W., and Brooks, B. R. (1995). Constant pressure molecular dynamics simulation: The Langevin piston method. *The Journal of Chemical Physics*, 103(11):4613–4621.
- Fernández-Roldán, J. A., De Riz, A., Trapp, B., Thirion, C., Vazquez, M., Toussaint, J.-C., Fruchart, O., and Gusakova, D. (2019). Modeling magnetic-field-induced domain wall propagation in modulated-diameter cylindrical nanowires. *Scientific Reports*, 9(1):5130.
- Filippov, B. N. (2002). Static properties and nonlinear dynamics of domain walls with a vortexlike internal structure in magnetic films (Review). *Low Temperature Physics*, 28(10):707–738.
- Florez, S. H., Krafft, C., and Gomez, R. D. (2005). Spin-current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires with constrictions. *Journal of Applied Physics*, 97(10):10C705.
- Fukunaga, H. F. H. and Inoue, H. I. H. (1992). Effect of intergrain exchange interaction on magnetic properties in isotropic Nd-Fe-B magnets. *Japanese Journal of Applied Physics*, 31(5R):1347.
- García-Palacios, J. L. and Lázaro, F. J. (1998). Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles. *Physical Review B*, 58(22):14937.
- Getzlaff, M. (2007). *Fundamentals of Magnetism*. Springer Science & Business Media.

REFERENCIAS

- Giess, E. A. (1980). Magnetic bubble materials. *Science*, 208(4446):938–943.
- Gilbert, T. (1955). A lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetic field. *Phys. Rev.*, 100:1243.
- Gilbert, T. L. (2004). A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE transactions on magnetics*, 40(6):3443–3449.
- Goldstein, H. (1994). *Classical Mechanics*. Editorial Reverté.
- Harutyunyan, D. (2014). Scaling laws and the rate of convergence in thin magnetic films. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 420(2):1744–1761.
- Harutyunyan, D. (2016). On the existence and stability of minimizers in ferromagnetic nanowires. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 434(2):1719–1739.
- Hayashi, M., Thomas, L., Bazaliy, Y. B., Rettner, C., Moriya, R., Jiang, X., and Parkin, S. S. P. (2006). Influence of current on field-driven domain wall motion in permalloy nanowires from time resolved measurements of anisotropic magnetoresistance. *Phys. Rev. Lett.*, 96:197207.
- Hayashi, M., Thomas, L., Rettner, C., Moriya, R., and Parkin, S. S. (2008). Real time observation of the field driven periodic transformation of domain walls in permalloy nanowires at the larmor frequency and its first harmonic. *Applied Physics Letters*, 92(11).
- Hayward, T. (2015). Intrinsic nature of stochastic domain wall pinning phenomena in magnetic nanowire devices. *Scientific reports*, 5(1):13279.
- Heisenberg, W. (1928). Zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Physik*, 49:619–636.
- Hernando, A., Navarro, I., and González, J. (1992). On the role of intergranular exchange coupling in the magnetization process of permanent-magnet materials. *Europhysics Letters*, 20(2):175.

REFERENCIAS

- Horniaková, J., Samuhel, S., Onufer, J., Duranka, P., Kladivová, M., and Ziman, J. (2023). Influence of temperature on domain wall geometry in bistable magnetic microwire. *AIP Conference Proceedings*, 2778(1):040011.
- Hubert, A. and Schäfer, R. (1998). *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*. Springer Science & Business Media.
- Ignat, R. and Moser, R. (2017). Néel walls with prescribed winding number and how a nonlocal term can change the energy landscape. *Journal of Differential Equations*, 263(9):5846–5901.
- Jackson, J. D. (2021). *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- Kittel, C. (1949). Physical theory of ferromagnetic domains. *Reviews of modern Physics*, 21(4):541.
- Kittel, C. (2004). *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8 edition.
- Knüpfer, H., Muratov, C. B., and Nolte, F. (2019). Magnetic domains in thin ferromagnetic films with strong perpendicular anisotropy. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 232:727–761.
- Knüpfer, H. and Shi, W. (2021). γ γ -limit for two-dimensional charged magnetic zigzag domain walls. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 239:1875–1923.
- Kyoung-Woong, M., Seungmo, Y., Tae-Seong, J., Changsoo, K., Byoung Sun, C., Sungkyun, P., and Chanyong, H. (2021). Universal method for magnetic skyrmion bubble generation by controlling the stripe domain instability. *NPG Asia Materials*, 13(1):20–28.
- Lakshmanan, M. (2011). The fascinating world of the landau–lifshitz–gilbert equation: an overview. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1939):1280–1300.

REFERENCIAS

- Landau, D. and Binder, K. (2021). *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press.
- Landau, L. D. and Lifshitz, L. M. (1935). On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Physik. Zeits. Sowjetunion*, 8:153–169.
- Landeros, P., Allende, S., Escrig, J., Salcedo, E., Altbir, D., and Vogel, E. (2007). Reversal modes in magnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, 90(10):102501.
- Landeros, P., Escrig, J., Altbir, D., Laroze, D., d’Albuquerque e Castro, J., and Vargas, P. (2005). Scaling relations for magnetic nanoparticles. *Physical Review B*, 71(9):094435.
- Landeros, P., Suarez, O., Cuchillo, A., and Vargas, P. (2009). Equilibrium states and vortex domain wall nucleation in ferromagnetic nanotubes. *Physical Review B*, 79(2):024404.
- Lenzing, N., Krüger, D., and Potthoff, M. (2025). Microscopic theory of spin friction and dissipative spin dynamics. *Physical Review B*, 111(1):014402.
- Lukaszew, R. A. (2015). *Handbook of nanomagnetism: applications and tools*. CRC Press.
- Lund, R. G., Muratov, C. B., and Slastikov, V. V. (2018). One-dimensional in-plane edge domain walls in ultrathin ferromagnetic films. *Nonlinearity*, 31(3):728.
- Lund, R. G., Muratov, C. B., and Slastikov, V. V. (2020). Edge domain walls in ultrathin exchange-biased films. *Journal of Nonlinear Science*, 30:1165–1205.
- Ma, P.-W., Dudarev, S., Semenov, A., and Woo, C. (2010). Temperature for a dynamic spin ensemble. *Physical Review E*, 82(3):031111.
- Mallick, S., Reyren, N., Thiaville, A., Ohresser, P., Jaouen, N., Cros, V., and Jeudy, V. (2025). Effects of antiferromagnetic coupling and pinning on domain wall dynamics in synthetic ferrimagnets. *Physical Review B*, 112(1):014437.
- Malozemoff, A. and Slonczewski, J. (1979). Ii - resume of classical magnetism and bubble

REFERENCIAS

- domain statics. In Malozemoff, A. and Slonczewski, J., editors, *Magnetic Domain Walls in Bubble Materials*, pages 7–39. Academic Press.
- Matick, R. (1972). Review of current proposed technologies for mass storage systems. *Proceedings of the IEEE*, 60(3):266–289.
- Mayergoyz, I. D., Bertotti, G., and Serpico, C. (2009). *Nonlinear magnetization dynamics in nanosystems*. Elsevier.
- Mazo-Zuluaga, J., Velásquez, E. A., Altbir, D., and Mejía-López, J. (2016). Controlling domain wall nucleation and propagation with temperature gradients. *Applied Physics Letters*, 109(12):122408.
- McMichael, R. D. and Donahue, M. J. (1997). Head to head domain wall structures in thin magnetic strips. *IEEE Transactions on Magnetics*, 33(5):4167–4169.
- Mejía-López, J., Altbir, D., Landeros, P., Escrig, J., Romero, A., Roshchin, I. V., Li, C.-P., Fitzsimmons, M., Batlle, X., and Schuller, I. K. (2010). Development of vortex state in circular magnetic nanodots: Theory and experiment. *Physical Review B*, 81(18):184417.
- Mejía-López, J., Altbir, D., Romero, A., Batlle, X., Roshchin, I. V., Li, C.-P., and Schuller, I. K. (2006). Vortex state and effect of anisotropy in sub-100-nm magnetic nanodots. *Journal of applied physics*, 100(10).
- Mejía-López, J., Soto, P., and Altbir, D. (2005). Asymmetric reversal of the hysteresis loop in exchange-biased nanodots. *Physical Review B*, 71(10):104422.
- Mejía-López, J., Velásquez, E., Mazo-Zuluaga, J., and Altbir, D. (2018). Thermal gradients for the stabilization of a single domain wall in magnetic nanowires. *Nanotechnology*, 29(34):345702.
- Mohakud, S., Andraus, S., Nishino, M., Sakuma, A., and Miyashita, S. (2016). Temperature dependence of the threshold magnetic field for nucleation and domain wall propagation in an inhomogeneous structure with grain boundary. *Phys. Rev. B*, 94:054430.

REFERENCIAS

- Moriya, R., Hayashi, M., Thomas, L., Rettner, C., and Parkin, S. S. P. (2010). Dependence of field driven domain wall velocity on cross-sectional area in Ni₆₅Fe₂₀Co₁₅ nanowires. *Applied Physics Letters*, 97(14):142506.
- Moriya, T. (1960). Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical review*, 120(1):91.
- Mougin, A., Cormier, M., Adam, J. P., Metaxas, P. J., and Ferré, J. (2007). Domain wall mobility, stability and walker breakdown in magnetic nanowires. *Europhysics Letters*, 78(5):57007.
- Nagyfalusi, B., Szunyogh, L., and Palotás, K. (2025). Theoretical determination of gilbert damping in reduced dimensions. *Physical Review B*, 111(21):214443.
- Nakatani, Y., Thiaville, A., and Miltat, J. (2005). Head-to-head domain walls in soft nano-strips: a refined phase diagram. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 290-291:750–753. Proceedings of the Joint European Magnetic Symposia (JEMS' 04).
- Nasirpouri, F., Peighambari-Sattari, S., Bran, C., Palmero, E., Berganza Eguiarte, E., Vazquez, M., Patsopoulos, A., and Kechrakos, D. (2019). Geometrically designed domain wall trap in tri-segmented nickel magnetic nanowires for spintronics devices. *Scientific Reports*.
- Néel, L. (1947). Le champ coercitif d'une poudre ferromagnétique cubique à grains anisotropes. *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences*, 224(22):1550–1551.
- Néel, L. (1955a). Chapter xv theoretical remarks on ferromagnetism at low temperatures. In *Progress in Low Temperature Physics*, volume 1, pages 336–343. Elsevier.
- Néel, L. (1955b). Energie des parois de bloch dans les couches minces. *Compt. Rendus. Acad. Sci. (Paris)*, 241:533–537.
- Nurdin, W. B. and Schotte, K.-D. (2000). Dynamical temperature for spin systems. *Physical Review E*, 61(4):3579.

REFERENCIAS

- Omelyan, I., Mryglod, I., and Folk, R. (2001). Algorithm for molecular dynamics simulations of spin liquids. *Physical review letters*, 86(5):898.
- Ono, T., Miyajima, H., Shigeto, K., Mibu, K., Hosoi, N., and Shinjo, T. (1999). Propagation of a magnetic domain wall in a submicrometer magnetic wire. *Science*, 284(5413):468–470.
- Oti, J. (1993). A micromagnetic model of dual-layer magnetic-recording thin films. *IEEE transactions on magnetics*, 29(2):1265–1275.
- Parkin, S. S. P., Hayashi, M., and Thomas, L. (2008). Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873):190–194.
- Pedrosa, S. S., Martins, S. M. S. B., J., Souza, R. M., Dantas, J. T. S., Souza, C. M., Rebouças, G. O. G., de Araújo, J. M., Dantas, A. L., and Carriço, A. S. (2018). Dipolar effects on the magnetic phases of superparamagnetic clusters. *Journal of Applied Physics*, 123(23):233902.
- Perera, D., Eisenbach, M., Nicholson, D. M., Stocks, G. M., and Landau, D. P. (2016). Reinventing atomistic magnetic simulations with spin-orbit coupling. *Physical Review B*, 93(6):060402.
- Prohl, A. et al. (2001). *Computational micromagnetism*. Springer.
- Radhakrishnan, B., Eisenbach, M., and Burrell, T. (2017). A new scaling approach for the mesoscale simulation of magnetic domain structures using monte carlo simulations. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 432:42–48.
- Rapaport, D. C. (2004). *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press.
- Rugh, H. H. (1998). A geometric, dynamical approach to thermodynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(38):7761.
- Schabes, M. E. (1991). Micromagnetic theory of non-uniform magnetization processes in

REFERENCIAS

- magnetic recording particles. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 95(3):249–288.
- Schlickeiser, F., Ritzmann, U., Hinzke, D., and Nowak, U. (2014). Role of entropy in domain wall motion in thermal gradients. *Phys. Rev. Lett.*, 113:097201.
- Schmidts, H., Martinek, G., and Kronmüller, H. (1992). Recent progress in the interpretation of nucleation fields of hard magnetic particles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 104:1119–1120.
- Schryer, N. L. and Walker, L. R. (1974). The motion of 180° domain walls in uniform dc magnetic fields. *Journal of Applied Physics*, 45(12):5406–5421.
- Slonczewski, J. C. (1972). DYNAMICS OF MAGNETIC DOMAIN WALLS. *AIP Conference Proceedings*, 5(1):170–174.
- Stoner, E. C. and Wohlfarth, E. P. (1948). A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 240:599—642.
- Thiaville, A. and Nakatani, Y. (2006). *Domain-Wall Dynamics in Nanowires and Nanostrips*, pages 161–205. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- Thomas, L. and Parkin, S. (2007). Current induced domain-wall motion in magnetic nanowires. In *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. John Wiley & Sons, Ltd.
- Tolley, R., Liu, T., Xu, Y., Le Gall, S., Gottwald, M., Hauet, T., Hehn, M., Moutine, F., Fullerton, E. E., and Mangin, S. (2015). Generation and manipulation of domain walls using a thermal gradient in a ferrimagnetic TbCo wire. *Applied Physics Letters*, 106(24):242403.
- Tranchida, J., Plimpton, S., Thibaudeau, P., and Thompson, A. (2018). Massively parallel symplectic algorithm for coupled magnetic spin dynamics and molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 372:406 – 425.

REFERENCIAS

- Vansteenkiste, A., Leliaert, J., Dvornik, M., Helsen, M., Garcia-Sanchez, F., and Van Waeyenberge, B. (2014). The design and verification of mumax3. *AIP advances*, 4(10).
- Varga, R., Richter, K., Zhukov, A., and Larin, V. (2008). Domain wall propagation in thin magnetic wires. *IEEE Transactions on Magnetics*, 44(11):3925–3930.
- Vargas, P., Altbir, D., and d’Albuquerque e Castro, J. (2006). Fast monte carlo method for magnetic nanoparticles. *Physical Review B*, 73(9):092417.
- Velásquez, E., Mazo-Zuluaga, J., and Mejía-López, J. (2013). Size dependence study of the ordering temperature in the fast monte carlo method. *Journal of Nanoparticle Research*, 15(2):1–12.
- Velásquez, E., Mazo-Zuluaga, J., Vargas, P., and Mejía-López, J. (2015). Bridging the gap between discrete and continuous magnetic models in the scaling approach. *Physical Review B*, 91(13):134418.
- Velásquez, E. A., Mazo-Zuluaga, J., and Mejía-López, J. (2023). Convolutd magnetoresistance and magnetic reversal processes in ni–fe segmented cylindrical nanodots with tunable size and composition for technological applications. *Advanced Theory and Simulations*, page 2300051.
- Velásquez, E. A., López-Moreno, S., Mazo-Zuluaga, J., and Mejía-López, J. (2017). Fe/ni core/shell nanowires and nanorods: a combined first-principles and atomistic simulation study. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19:16267–16275.
- Victoria, R. (1988). Micromagnetic predictions for barium ferrite particles. *Journal of Applied Physics*, 63(8):3423–3428.
- Vos, M., Brott, R. L., Zhu, J.-G., and Carlson, L. W. (1993). Computed hysteresis behavior and interaction effects in spheroidal particle assemblies. *IEEE transactions on magnetics*, 29(6):3652–3657.
- Weiss, P. (1907). The hypothesis of the molecular field and the property of ferromagnetism. *J. de Phys. Rad*, 6(4):661–690.

REFERENCIAS

- Wikipedia® (2008). Domain walls by zureks.png. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Domain_walls_by_Zureks.png, note = Accedido en noviembre de 2023, language = english.
- Wunderlich, J., Ravelosona, D., Chappert, C., Cayssol, F., Mathet, V., Ferre, J., Jamet, J.-P., and Thiaville, A. (2001). Influence of geometry on domain wall propagation in a mesoscopic wire. *IEEE Transactions on Magnetics*, 37(4):2104–2107.
- Yan, P., Cao, Y., and Sinova, J. (2015). Thermodynamic magnon recoil for domain wall motion. *Phys. Rev. B*, 92:100408.
- Yan, Y. D. and Della Torre, E. (1988). Reversal modes in fine particles. *Le Journal de Physique Colloques*, 49(C8):C8–1813.
- Yang, B. and Fredkin, D. R. (1998). Dynamical micromagnetics by the finite element method. *IEEE transactions on magnetics*, 34(6):3842–3852.
- Youk, H., Chern, G.-W., Merit, K., Oppenheimer, B., and Tchernyshyov, O. (2006). Composite domain walls in flat nanomagnets: The magnetostatic limit. *Journal of Applied Physics*, 99(8):08B101.
- Yu, H., Granville, S., Yu, D. P., and Ansermet, J.-P. (2010). Evidence for thermal spin-transfer torque. *Phys. Rev. Lett.*, 104:146601.
- Zhang, W. and Haas, S. (2010). Phase diagram of magnetization reversal processes in nanorings. *Physical Review B*, 81(6):064433.
- Zhang, W., Singh, R., Bray-Ali, N., and Haas, S. (2008). Scaling analysis and application: phase diagram of magnetic nanorings and elliptical nanoparticles. *Physical Review B*, 77(14):144428.
- Zhou, X., Pan, Z., and Ma, F. (2023). Domain wall based spin torque nano-oscillator in Z-type magnetic nanowire with perpendicular magnetic anisotropy. *Journal of Applied Physics*, 134(5):053902.

REFERENCIAS

- Zhu, J.-G. (1992). Modeling of multilayer thin film recording media. *IEEE transactions on magnetics*, 28(5):3267–3269.
- Zhukov, A., Blanco, J., Ipatov, M., Talaat, A., and Zhukova, V. (2017). Engineering of domain wall dynamics in amorphous microwires by annealing. *Journal of Alloys and Compounds*, 707:35–40. Selected papers presented at ISMANAM 2016, July 3rd-8th, Nara, Japan.
- Zhukov, A., Blanco, J. M., Ipatov, M., and Zhukova, V. (2013). Fast magnetization switching in thin wires: Magnetoelastic and defects contributions. *Sensor Letters*, 11(1):170–176(7).
- Zhukova, V., Blanco, J. M., Chizhik, A., Ipatov, M., and Zhukov, A. (2018). Ac-current-induced magnetization switching in amorphous microwires. *Frontiers of Physics*, 13(2):137501.
- Zhukova, V., Blanco, J. M., Rodionova, V., Ipatov, M., and Zhukov, A. (2012). Domain wall propagation in micrometric wires: Limits of single domain wall regime. *Journal of Applied Physics*, 111(7):07E311.
- Óvári, T.-A., Corodeanu, S., and Chiriac, H. (2011). Domain wall velocity in submicron amorphous wires. *Journal of Applied Physics*, 109(7):07D502.

ANEXOS A

Complemento de los Algoritmos

A.1. Ejemplo del input.dat usado en la dinámica de espines

Nombre de archivo de datos de la estructura
nw1000x60.xyz
Nombre de archivo de datos de salida
dat_nw1000x60
Numero pasos DM, dt (en picosegundos), c/cuanto se guarda conf.
1000 0.01 100
const.de exchange Jex (meV) en orden de aparicion en xyz 11,12,13,22,23,...
0.09
constantes de anisotropia uniaxial Ku (meV) en orden de aparicion en xyz
0.0
direccion polar y azimutal de Ku en orden aparicion
45. 33.
factores de Lande g en orden de aparicion
2.2
Magnitud campo magnetico (en Teslas)
0.2
Direccion del campo polar y azimutal (en grados): Hteta Hphi
0.0 0.0
Temperatura (en K)
0.021
Semilla de numero aleatorio, constante de amortiguamiento DM
-35649 0.01
conf. inicial de espines 0 desde arch de la estructura, 1 ord, 2 aleat
1
direcciones th y phi en el caso 1 en orden de aparicion
180. 0.
Nº de espin desde donde se considera sin campo magnetico (0 considera todos)
1519

A.2. Ejemplo del input usado en Mumax3

```
setGridSize(24,24,384)
setCellSize(3e-9, 3e-9, 3e-9)
EdgeSmooth = 8
Msat = 1.707e6
Aex = 4.817734e-11
alpha = 0.02
m = uniform(0,0,-1)
struc := cylinder(60e-9, 1000e-9) // verificar que el diametro y longitud sean
//menores que 24x3 obtenidos del setGridxserCell

setGeom(struc)
saveas(geom, "cil60x1000")
save(m)
TableAdd(E_total)
//TableSave()
temp=10
Thermseed(12892)
defregion(1, zrange(-inf, 224e-9)) // parte con campo (224 = 800 - 384*3/2)
defregion(2, zrange(224e-9, inf)) // 20 % sin campo (30 % = 300 + 50 %
// donde pone 0)

save(regions)
B_ext.setregion(1, vector(0,0,0.5))
B_ext.setregion(2, vector(0,0,0))
save(B_ext)
tableAdd(m.Region(1))
autosave(m, 5e-12)
tableautosave(1e-12)
Run(3000e-12)
```

ANEXOS B

Cálculos Complementarios

B.1. Interacción dipolar de dos espines perpendiculares a un plano

En este anexo se demuestra que la configuración magnética de dos espines, cuyas direcciones son perpendiculares a un plano, que minimiza la energía dipolar es una configuración antiferromagnética. Como se vio en la sección 2.2, la energía debida a la interacción dipolar de dos espines está dada por

$$E_D = \frac{\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{S}_1 \cdot \vec{r})(\vec{S}_2 \cdot \vec{r})}{r^5} \quad (\text{B.1})$$

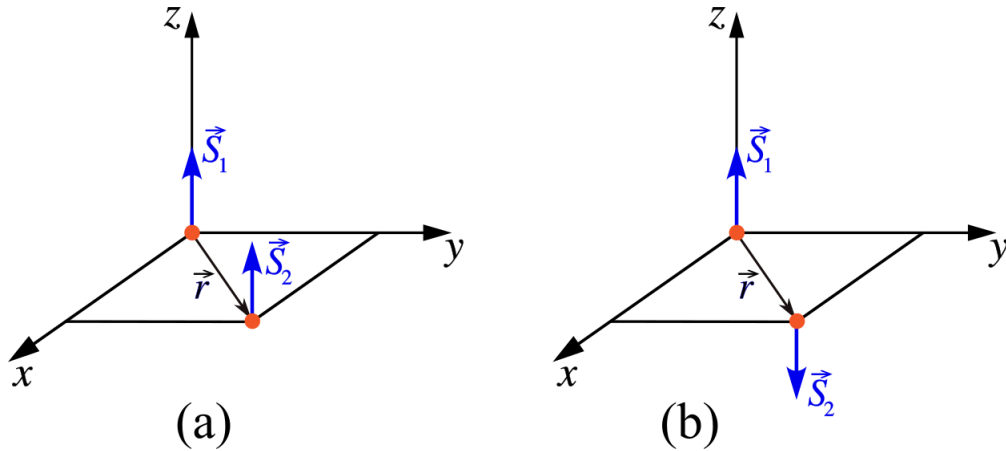


Figura B.1. Configuración magnética de dos espines perpendiculares al plano xy . (a) Configuración ferromagnética, y (b) configuración antiferromagnética

Si consideramos que los espines son perpendiculares al plano xy , como se muestran en las figuras Fig.B.1a y Fig.B.1b, entonces se tiene que $\vec{S}_1 \cdot \vec{r} = \vec{S}_2 \cdot \vec{r} = 0$ y por lo tanto las energías de las dos configuraciones, con $|\vec{S}_1| = |\vec{S}_2| = S$, son

$$E_{DFM} = \frac{S^2}{r^3} \quad (\text{B.2})$$

para la configuración ferromagnética, y

$$E_{DAF} = -\frac{S^2}{r^3} \quad (\text{B.3})$$

para la configuración antiferromagnética. Es claro entonces que $E_{DAF} < E_{DFM}$.

B.2. Resultados Publicados

En las páginas siguientes se adjunta el artículo publicado en la revista científica ADVANCED THEORY AND SIMULATIONS, con DOI: <https://doi.org/10.1002/adts.202500272>.

Este trabajo fue desarrollado en el marco de la presente tesis doctoral y recoge de manera concisa parte de los resultados aquí presentados. Su publicación en una revista revisada por pares respalda la calidad y relevancia del estudio realizado.

Se incluye a continuación con el fin de proporcionar evidencia adicional del trabajo llevado a cabo y facilitar su consulta directa.

Este artículo debe citarse como:

J. Murillo-Polo, J. Mazo-Zuluaga, E. A. Velásquez, and J. Mejía-López, “Fast Atomistic Spin Dynamics (FASD): A Scalable Approach for Time-Dependent Magnetic Phenomena in Nanostructures” *Adv. Theory Simul.* (2025): e00272. <https://doi.org/10.1002/adts.202500272>