

Simulaciones Micromagnéticas en Nanohilos Ferromagnéticos de Co-Ni con Anisotropía Transversal

Nicolás Barrios Pizo

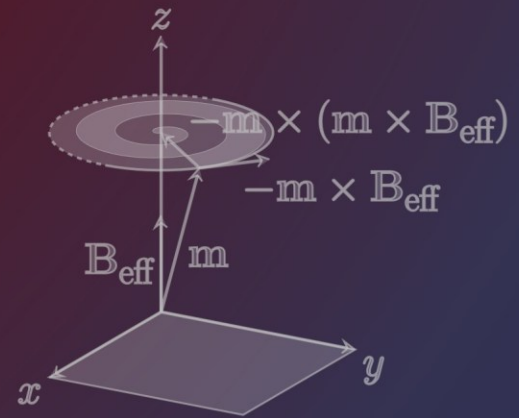
Supervisores

Dr. Luis Alfredo Rodríguez González

Dra. Lorena Marín Mercado

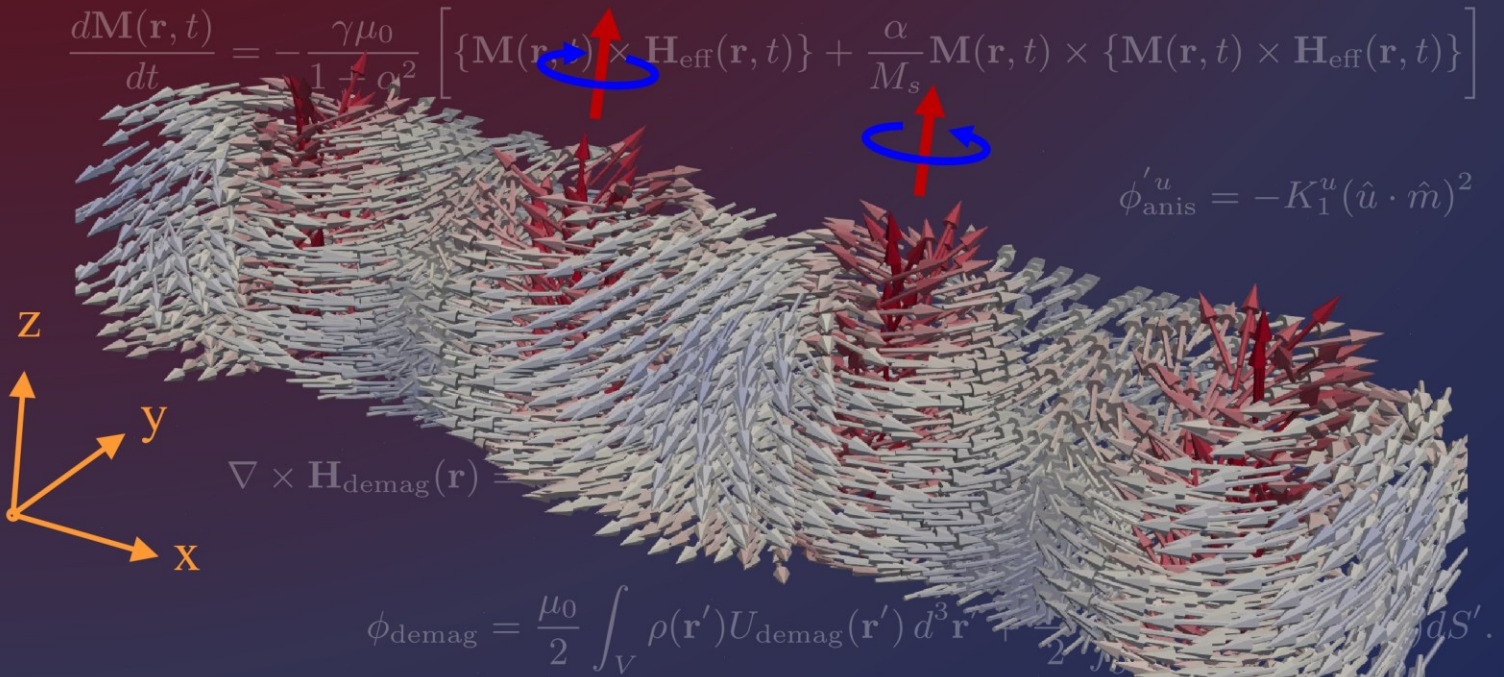
$$\hat{n} \cdot \nabla \gamma_i(\mathbf{r}) = 0$$

$$\phi'_{\text{ex}}(\mathbf{r}) = -A \sum_{i=1}^3 [\nabla \gamma_i(\mathbf{r})]^2$$



$$\frac{d\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\frac{\gamma \mu_0}{1 + \alpha^2} \left[\{\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)\} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \times \{\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)\} \right]$$

$$\phi'_{\text{anis}} = -K_1^u (\hat{u} \cdot \hat{m})^2$$



$$\phi_{\text{demag}} = \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' + \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' + \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$$

$$\phi'_{\text{Zeeman}}(\mathbf{r}) = -\mu_0 \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$$





Simulaciones Micromagnéticas en Nanohilos Ferromagnéticos de Co-Ni con Anisotropía Transversal

Nicolás Barrios Pizo

Universidad del Valle

Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Física

Santiago de Cali, Colombia

2025

Simulaciones Micromagnéticas en Nanohilos Ferromagnéticos de Co-Ni con Anisotropía Transversal

Nicolás Barrios Pizo
201824728-3146

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:

Físico

Director:

Dr. Luis Alfredo Rodríguez González

Codirectora:

Dra. Lorena Marín Mercado

Grupos de Investigación:

Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales

Grupo de Películas Delgadas

Universidad del Valle

Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Física

Santiago de Cali, Colombia

2025

*A mi madre,
sin quien este trabajo
quizá nunca habría existido*

Contenido

Índice de figuras	6
Índice de tablas.....	9
1 Introducción	12
2 Objetivos	14
2.1 Objetivo General	14
2.2 Objetivos específicos	14
3 Marco Teórico	15
3.1 Teoría general del micromagnetismo.....	15
3.1.1 Introducción	15
3.1.2 Términos de energía	16
3.1.3 Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert	23
3.2 Software de simulaciones micromagnéticas: <i>mumax</i> ³	25
3.3 Nanohilos ferromagnéticos de Co ₈₅ Ni ₁₅	26
4 Detalles experimentales	30
4.1 Geometría y parámetros magnéticos	30
4.1.1 Detalles de las simulaciones micromagnéticas	31
4.2 Resultados y discusión	34
4.2.1 Formación de vórtices magnéticos transversales.....	34
4.2.2 Variación del ángulo de aplicación del campo magnético externo de saturación	38
4.3 Simulaciones micromagnéticas a temperatura ambiente	47
4.4 Variación del diámetro del nanohilo	48
4.4.1 Inversión de polaridad individual de vórtice magnético.....	50
5 Conclusiones.....	54
6 Perspectivas	56
Anexos	57
Referencias	63

Índice de figuras

Figura 1. Posiciones relativas de momentos e interacciones de intercambio entre átomos vecinos.....	17
Figura 2. Energía magnetostática de un cuerpo magnético.....	18
Figura 3. a) Configuración que maximiza la energía magnetostática ($\theta = \pi/2$). b) Configuración que minimiza la energía magnetostática ($\theta = 0$).....	19
Figura 4. Direcciones de fácil magnetización y superficie de energía de anisotropía magnetocristalina para las estructuras SC, BCC y FCC. a) $K_1 > 0$. b) $K_1 < 0$	20
Figura 5. Direcciones de fácil magnetización y superficie de energía de anisotropía magnetocristalina para las estructuras HCP. a) $K_1 > 0$. b) $K_1 < 0$	21
Figura 6. Medio magnético sometido a un campo magnético externo.	22
Figura 7. Representación de la evolución en el tiempo de la magnetización del sistema. El primer término de la ecuación LLG corresponde a un movimiento de precesión alrededor B_{eff} , mientras que el segundo término describe la disipación presente en el medio.	24
Figura 8. Rendimiento en millones de celdas por segundo en función de la tarjeta de video empleada. La gráfica se construyó con ayuda de los datos sacados del repositorio oficial de mumax ³ en GitHub [27].	26
Figura 9. Imágenes TEM obtenida sobre un nanohilo de $Co_{85}Ni_{15}$ individual: a) imagen holografía electrónica del cambio de fase de la onda electrónica que atraviesa la muestra por la presencia de campos magnéticos, b) imagen holografía electrónica del flujo magnético, c) imagen ASTAR para identificar la estructura cristalina local a lo largo del nanohilo, d) imagen compuesta por la superposición de a) y c) en donde solo la fase HCP es visible [10].	27
Figura 10. Resultados de las simulaciones micromagnéticas realizada en nanohilos de $Co_{85}Ni_{15}$ con anisotropía transversal. a) Esquema de la geometría y estructura cristalina del nanohilo simulado. b) y c) formación de cadena VTM por la aplicación de un campo magnético de saturación perpendicular al nanohilo. d) formación de LMV por la aplicación de un campo magnético de saturación paralelo al nanohilo. Figura extraída de [6].	28
Figura 11. (a) Universo del sistema generado en mumax ³ . (b) Dimensiones de cada celda del universo.....	30
Figura 12. Esquema 2D del nanohilo de $Co_{85}Ni_{15}$ a simular: (a) corte longitudinal (plano xy) realizado a media altura del eje z. (b) corte transversal (plano yz).	31
Figura 13. Proceso de excitación y desexcitación para llevar al sistema a remanencia. Este proceso consta de tres etapas: Primera etapa, saturación del sistema; segunda etapa, remoción del campo magnético; tercera etapa, evolución del sistema hasta el estado de remanencia.	32

Figura 14. Diagrama de flujo de aplicación de campos magnéticos mediante una función sigmoide.....	33
Figura 15. (a) Representación 3D del proceso de saturación de la magnetización del sistema a 2 T. (b) Representación vectorial de la dirección del campo de saturación aplicado (B_{ext}). Representación 3D del estado remanente luego de realizar una simulación (c) estática y (d) dinámica usando mumax ³ . Los colores de las representaciones 3D indican la componente x la magnetización.	35
Figura 16. Evolución de la magnetización del nanohilo a medida que disminuye de B_{ext} . a) Código QR que nos enlaza a una animación del proceso. Instantáneas extraídas de la animación cuando B_{ext} alcanza valores de (a) 0.839 T, c) 0.73 T y d) 0.233 T.	36
Figura 17. (a) Evolución de las energías micromagnéticas en función del campo externo aplicado, correspondientes a la simulación ilustrada en la Figura 16. (b) Ampliación de la sección destacada en (a).	37
Figura 18. a) Vórtices magnéticos de quiralidad alternada. b) Tendencia de la magnetización a orientarse paralelamente a la superficie marginal del sistema para minimizar energía. c) Esquema de la orientación de los momentos magnéticos en las regiones extremas del nanohilo pertenecientes a la fase FCC. d) Polarización de los TMV orientado paralelamente en la dirección del campo aplicado.	38
Figura 19. Diagrama de flujo para la variación de orientación del campo magnético aplicado.	39
Figura 20. Esquema que ilustra los barridos del campo magnético externo.	39
Figura 21. Representación 3D de los estados remanentes representativos y sus energías totales al variar el ángulo del campo de saturación en (a) barridos longitudinales (plano xz) y (b) barridos transversales (plano yz). Los códigos QR al lado de los gráficos enlazan a animaciones que muestran cómo varía el estado remanente del nanohilo en función del ángulo de saturación.	40
Figura 22. Secciones medias de las estructuras remanentes obtenidas durante el barrido longitudinal para los ángulos: a) $\theta_{xz} = -2.64^\circ$ y b) $\theta_{xz} = 3.28^\circ$	41
Figura 23. Comportamiento de las energías micromagnéticas en función del ángulo para el a) barrido longitudinal y b) barrido transversal.	42
Figura 24. a) Código QR que enlaza a una animación del proceso de formación del estado LMV/CDW/LMV cuando se satura el sistema usando una inclinación de 4° , en un barrido longitudinal. Una secuencia de los estados más representativos de la animación se muestra entre c) y g).	43
Figura 25. (a) Evolución de las energías micromagnéticas del sistema para el estado remanente LMV/CDW/LMV obtenido al saturar el sistema a 4° respecto al eje z (barrido longitudinal). (b) Ampliación de la sección destacada en (a). Las líneas continuas	

corresponden a las energías del estado LMV/CDW/LMV, los puntos transparentes son las mismas presentadas en la Figura 17.	44
Figura 26. Secuencia representativa de estados visualizados en proyección lateral que ilustran la evolución temporal sistema. Las imágenes a) a d) corresponden a $\theta_{xz} = 8^\circ$, mientras que las imágenes e) a h) muestran la evolución bajo la condición $\theta_{xz} = 0^\circ$. El código QR que enlaza a una animación de la evolución temporal de ambos casos.	46
Figura 27. Simulaciones de la estructura remanente en el nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ para distintas orientaciones del campo externo en plano xz a (a) $T = 0\text{ K}$ y (b) $T = 300\text{ K}$	47
Figura 28. Estado remanente en función del diámetro de nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$	49
Figura 29. Distancia entre TMV y número de núcleos TMV en función del diámetro del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$. Se han considerado únicamente las disposiciones TMV completas y bien definidas.	50
Figura 30. Diagrama de flujo que describe el proceso de inversión de polarización de un núcleo de TMV individual mediante la aplicación de un campo magnético de tipo función paso.	51
Figura 31. Representación gráfica del estado de quiralidad de los TMV antes y después de la inversión de polarización. Se observa que la quiralidad se mantiene constante, mientras que la polarización del núcleo objetivo se invierte.	52
Figura 32. Nomenclatura para la dirección de la polaridad de cada núcleo.	53

índice de tablas

Tabla 1. Modelos establecidos para la descripción del ferromagnetismo a diferentes escalas de longitud [11].	15
Tabla 2. Comparación energética de distintas configuraciones magnéticas. Tabla adaptada de [16].	23
Tabla 3. Se comparan los tiempos promedio de 100 simulaciones realizadas para cada uno de los tres enfoques para realizar las simulaciones del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$: estática, dinámica y mixta. Las estáticas y dinámicas se desarrollaron exclusivamente usando minimización de energía e integración numérica, respectivamente. Las mixtas implementan el criterio de transición entre simulaciones dinámicas a estáticas.	33
Tabla 4. Comparación de resultados entre valores calculados teóricamente y los obtenidos numéricamente para un nanohilo cilíndrico de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ saturado con un campo de 2 T perpendicular al plano donde yace el eje fácil de anisotropía uniaxial.	34
Tabla 5. Contribución porcentual absoluta de la energía de anisotropía, desmagnetización, intercambio y térmica en el estado remanente en cada ángulo de aplicación de campo magnético.	48

Resumen

El estudio de los estados remanentes de nanohilos magnéticos es crucial para aplicaciones tecnológicas en grabación magnética, espintrónica y dispositivos de memoria de alta densidad. En este trabajo, realizamos simulaciones micromagnéticas para investigar la formación de vórtices magnéticos transversales (TMV, por sus siglas en inglés) en nanohilos ferromagnéticos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ con anisotropía magnetocristalina transversal al eje de simetría del cilindro. Mediante el software *mumax*³, resolvimos numéricamente las ecuaciones de Landau-Lifshitz-Gilbert para el estudio de estados magnéticos remanentes en función de la orientación del campo externo aplicado, la temperatura y el diámetro del nanohilo.

Se encontró que las cadenas TMV, a cero absoluto (0 K), emergen como estados remanentes estables cuando el campo magnético de saturación (2 T) se aplica en una orientación cercana a la dirección perpendicular al plano el eje de anisotropía uniaxial y de simetría del nanohilo. Para un barrido longitudinal, estas configuraciones surgen de entre -2.56° y 2.56° , mientras que para un barrido transversal aparecen entre -4.7° y 4.7° , evidenciando una marcada dependencia con la dirección de saturación del sistema. Si mantenemos esta misma condición de perpendicularidad, se encuentra que la formación de la cadena no se ve condicionada por la temperatura, al menos si se realizan simulaciones a 300 K, pero sí que se ve ligeramente alterada cuando cambiamos el diámetro del nanohilo. En efecto, un incremento en el diámetro (de 60 a 140 nm, en intervalos regulares de 5 nm) reduce la cantidad de TMV a lo largo del nanohilo o puede alterar la estructura regular de la cadena TMV.

Finalmente, se propone un método para realizar la inversión localizada de la polarización del núcleo del vórtice. Los resultados indican que la nucleación de la polarización de un TMV es posible para un campo 178 mT, manteniéndose además la quiralidad del TMV durante todo el proceso. En consecuencia, dada la naturaleza binaria de la polarización, se evidencia el posible potencial de estas estructuras para aplicaciones como memorias magnéticas de tipo *racetrack* de alta velocidad.

Palabras clave: Simulaciones micromagnéticas, anisotropía transversal, cadena de vórtices, vórtices magnéticos, nanohilos.

Abstract

The study of the remnant states of magnetic nanowires is crucial for technological applications in magnetic recording, spintronics, and high-density memory devices. In this work, we performed micromagnetic simulations to investigate the formation of transverse magnetic vortices (TMV) in ferromagnetic nanowires of $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ with magnetocrystalline anisotropy transverse to the symmetry axis of the cylinder. Using the *mumax*³ software, we numerically solved the Landau-Lifshitz-Gilbert equations to study the remnant magnetic states as a function of the orientation of the applied external field, temperature, and the nanowire diameter.

It was found that TMV chains, at absolute zero (0 K), emerge as stable remnant states when the saturation magnetic field (2 T) is applied at an orientation close to the direction perpendicular to the plane defined by the uniaxial anisotropy and the symmetry axis of the nanowire. For a longitudinal sweep, these configurations emerge between -2.56° and 2.56° , while for a transverse sweep they appear between -4.7° and 4.7° , evidencing a marked dependence on the system's saturation direction. Under the same perpendicularity condition, it is observed that the formation of the chain is not conditioned by temperature, at least in simulations conducted at 300 K, but it is slightly altered when the nanowire diameter is changed. In fact, an increase in diameter (from 60 to 140 nm, in regular intervals of 5 nm) reduces the number of TMVs along the nanowire or can alter the regular structure of the TMV chain.

Finally, a method is proposed to achieve localized inversion of the vortex core polarization. The results indicate that the nucleation of the polarization of a TMV is possible with a field of 178 mT, while the chirality of the TMV is maintained throughout the process. Consequently, given the binary nature of the polarization, these structures show potential for applications such as high-speed racetrack-type magnetic memories.

Keywords: Micromagnetic simulations, transverse anisotropy, vortex chain, magnetic vortices, nanowires.

1 Introducción

El estudio de nanoestructuras magnéticas posee especial relevancia por su gran potencial en aplicaciones tecnológicas como la grabación magnética [1], espintrónica [2], memorias magnéticas de acceso aleatorio (MRAM, por sus siglas en inglés) [3] y biomedicina [4]. A escala nanométrica, el comportamiento de los materiales magnéticos se aleja enormemente de las propiedades características que poseen a nivel macroscópico, debido a que en estas dimensiones espaciales empiezan a ser relevantes interacciones que a gran escala son despreciables, lo que da origen a una amplia gama de fenómenos y procesos físicos que pueden ser aprovechados para diseñar materiales magnéticos con propiedades exóticas que no pueden ser replicadas a grandes escalas [5].

En el caso de nanohilos cilíndricos con anisotropía magnética transversal, sus estados remanentes se componen de vórtices magnéticos los cuales pueden acomodarse de forma transversal, formando cadenas de vórtices con quiralidad alternante, o de forma longitudinal separados por estados denominados paredes de dominio quiral [6]. La manipulación y control, tanto individual como colectivo, de estas configuraciones magnéticas abren las puertas a posibles aplicaciones en el almacenamiento de información tales como las memorias magnéticas tipo *racetrack* [7], así como en compuertas lógicas [8]. Además, el desplazamiento rápido de las paredes de dominio sugiere que un dispositivo que aproveche la diversidad de estas configuraciones magnéticas podría operar con una velocidad excepcional [9].

En este trabajo de investigación se estudia la nanoestructura remanente de un nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, con anisotropía magnetocristalina perpendicular a su eje de simetría, mediante simulaciones micromagnéticas empleando *mumax*³. En este sistema, de acuerdo a lo reportado experimentalmente por Andersen y colaboradores [10], la magnetización se dispone formando vórtices magnéticos transversales bajo la influencia en campos de saturación aplicados de manera específica. De este modo, con el objetivo de ampliar y profundizar los estudios llevados a cabo por Andersen, en el presente trabajo se realizan simulaciones micromagnéticas orientadas a identificar condiciones adicionales bajo las cuales se puede observar cadenas TMV. En primer lugar, se analizó el efecto de la orientación del campo magnético de saturación en la formación de cadenas TVM para barridos longitudinales y transversales. Además, se consideró la influencia de la temperatura, realizando simulaciones a 300 K para evaluar la estabilidad térmica de la configuración en condiciones cercanas a la ambientales. Paralelamente, se investigó el efecto del diámetro del nanohilo, examinando de qué manera esta variable geométrica condiciona la aparición y características de la disposición TMV. Finalmente, se demostró que en este sistema es posible registrar información aprovechando binariedad de la polarización de los TMV, la cual

logra a través de la inversión localizada de la polarización de un único TMV. La realización de este amplio conjunto de simulaciones fue posible gracias al uso del software *mumax*³.

2 Objetivos

2.1 Objetivo General

Estudiar la formación de vórtices magnéticos transversales en nanohilos cilíndricos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ y su dependencia con variables internas y externas.

2.2 Objetivos específicos

OE1: Estudiar la formación de vórtices magnéticos transversales como función de la orientación del campo magnético de saturación.

OE2: Estudiar la formación de vórtices magnéticos transversales como función del diámetro del nanohilo y la temperatura.

3 Marco Teórico

3.1 Teoría general del micromagnetismo

3.1.1 Introducción

Los materiales ferromagnéticos, desde la perspectiva de la física teórica, se describe con mayor precisión utilizando la mecánica cuántica. En este enfoque, el ferromagnetismo se modela como un problema de N cuerpos (átomos comportándose como dipolos magnéticos), cuya complejidad crece exponencialmente con el incremento de N , por lo que cálculos analíticos están restringidos a sistemas muy pequeños [11]. Para describir los materiales ferromagnéticos a escala macroscópica, se han desarrollado diversos modelos aproximados. Cada modelo, dependiendo de las simplificaciones que introduce, es capaz de representar el sistema con precisión solo bajo ciertas condiciones y a una escala de longitud específica. La Tabla 1 resume los modelos más utilizados para describir ferromagnetos en distintas escalas.

Modelo	Descripción	Escala de longitud
Teoría a nivel atómico	Cálculos ab initio de mecánica cuántica	$< 1 \text{ nm}$
Teoría micromagnética	Descripción continua de la magnetización	$1 - 1000 \text{ nm}$
Teoría de dominios	Descripción de la estructura del dominio magnético	$1 - 1000 \text{ }\mu\text{m}$
Teoría de fases	Descripción de conjuntos de dominios	$> 0.1 \text{ mm}$

Tabla 1. Modelos establecidos para la descripción del ferromagnetismo a diferentes escalas de longitud [11].

En particular, la teoría del micromagnetismo ha demostrado ser una herramienta efectiva para describir el proceso de magnetización a escala micrométrica. A diferencia de la teoría de dominios, permite analizar la estructura interna de las paredes de dominio. Además, las ecuaciones micromagnéticas pueden resolverse numéricamente en sistemas de mayor tamaño en comparación con los enfoques atomísticos. En el micromagnetismo, se considera el vector de magnetización $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ como una función continua de las coordenadas. Además, para el estudio de estos sistemas bajo estas condiciones se emplea densidad de energía libre de Gibbs dada por

$$\phi'_l = U - TS - \beta \cdot \varepsilon - \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}},$$

donde U es la densidad de energía interna del sistema la cual contiene las densidades de energía de intercambio, anisotropía magnetocristalina, magnetostática y elástica; S es la densidad de entropía del sistema y ε es el tensor de deformación. Así mismo, los parámetros como la temperatura (T), el tensor de estrés β y el campo magnético externo aplicado ($\mathbf{B}_{\text{ext}}$)

son variables libres [12]. Los dos últimos términos de la expresión corresponden al trabajo realizado al sistema debido a deformaciones bajo un estrés externo y el realizado por un campo externo, respectivamente. Como veremos más adelante, el enfoque micromagnético básico consiste en formular la energía en términos del campo vectorial de magnetización, y minimizar esta energía para determinar configuraciones estables de magnetización.

Para aplicar la teoría del micromagnetismo a un sistema magnético, es necesario que se cumplan ciertas condiciones, entre las cuales se incluyen: (i) la magnetización se considera como un campo vectorial continuo de las coordenadas y del tiempo (campo vectorial de magnetización); (ii) la magnetización, es una función diferenciable; (iii) la norma de la magnetización se mantiene constante en el espacio y el tiempo, estando determinada por la magnetización de saturación del material, M_s .

3.1.2 Términos de energía

3.1.2.1 Energía de intercambio

El hamiltoniano de intercambio de Heisenberg describe la interacción entre el espín $\hat{\mathbf{S}}_i$ del i -ésimo átomo con el espín $\hat{\mathbf{S}}_j$ del j -ésimo átomo en un medio material. Este término de energía da cuenta del ordenamiento a largo alcance de los momentos dipolares magnéticos y suministra una representación mecánico-cuántica fundamental en el entendimiento del proceso de magnetización espontánea presente en los sistemas ferromagnéticos. Asimismo, ofrece una imagen microscópica más acertada del fenómeno de ordenamiento magnético que la provista por P. Weiss en 1907 con su propuesta de campo medio molecular [13]. Dicho hamiltoniano está dado por

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

donde J_{ij} es la constante de intercambio entre átomo i -ésimo y el átomo j -ésimo. Así pues, para dar una descripción continua de la interacción de intercambio, reemplazamos los operadores cuánticos de espín $\hat{\mathbf{S}}_i$ definidos en el espacio de Hilbert por vectores clásicos $\mathbf{S}_i$ definidos en el espacio euclidiano (Figura 1). Por otro lado, en el micromagnetismo clásico, cuando la temperatura del sistema es mucho menor que la temperatura de Curie (T_C), es decir, $T_C \gg T$, la magnetización de saturación, M_s , es prácticamente constante y, por tanto, el vector de magnetización puede expresarse en términos de los cosenos directores $\gamma_i(\mathbf{r})$ como [12]

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = M_s \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}, t), \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}, t) = \gamma_1(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{i}} + \gamma_2(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{j}} + \gamma_3(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{k}}.$$

Conjuntamente, si restringimos las interacciones de intercambio únicamente a los primeros átomos vecinos $J_{ij} \approx J_0$ y asumimos que la dirección del vector de espín varíe muy levemente en el espacio ($\phi_{ij} \ll 1$), se llega a que la densidad de energía de intercambio es¹

$$\phi'_{ex}(\mathbf{r}) = -A \sum_i [\nabla \gamma_i(\mathbf{r})]^2 \quad \text{con} \quad i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

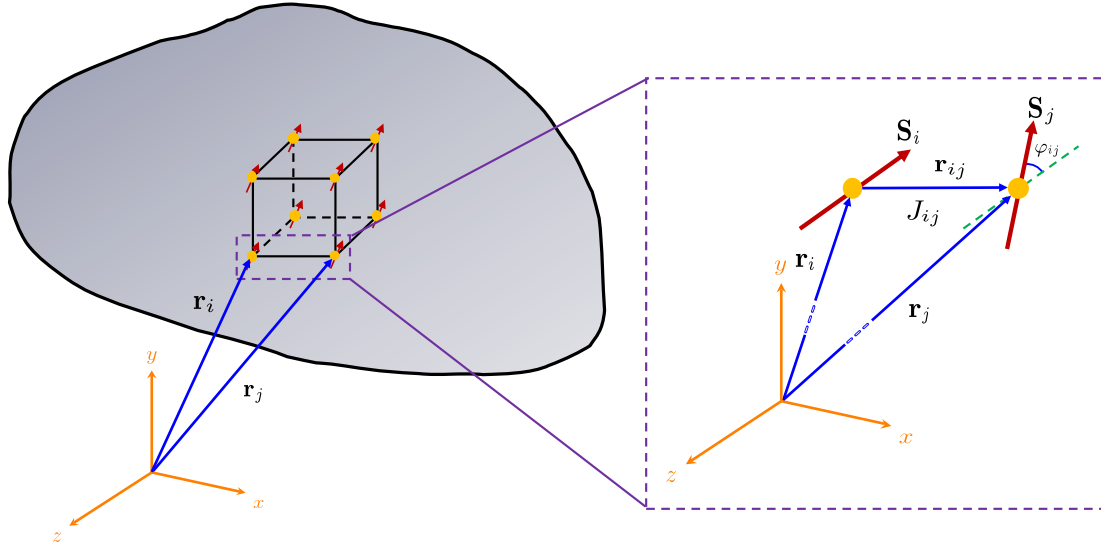


Figura 1. Posiciones relativas de momentos e interacciones de intercambio entre átomos vecinos.

donde A es la constante de rigidez de intercambio. La energía de intercambio se minimiza cuando la magnetización es perfectamente uniforme, por lo que se tiende a favorecer las configuraciones en las que la magnetización varía muy poco a lo largo de la muestra.

3.1.2.2 Energía magnetostática

Los átomos en los materiales magnéticos, en general, pueden ser modelados mediante momentos magnéticos dipolares μ_i asociados a cada uno de estos. En este sentido, los sólidos cristalinos consisten en una colección de dipolos magnéticos distribuidos de forma regular en el espacio. De tal forma, el campo y energía dipolar están determinados mediante la suma de las contribuciones individuales de cada dipolo dadas por

$$\mathbf{B}_{\text{dip}}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{4\pi} \sum_{j \neq i} \frac{3(\mu_j \cdot \hat{n})\hat{n} - \mu_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} \quad \text{y} \quad \phi_{\text{dip}} = -\frac{1}{2} \sum_i \mu_i \cdot \mathbf{B}_{\text{dip}}(\mathbf{r}_i),$$

respectivamente, donde $\mathbf{r}_j$ es la posición del átomo j -ésimo y $\hat{n}$ es un vector unitario paralelo a $\mathbf{r}_i$. En ausencia de campo externo, el campo magnetostático generado por el

¹ En estructuras HCP, esta expresión, en general, no se satisface, ya que el intercambio entre los átomos en el plano basal ($A_{\parallel}$) es distinto al intercambio entre los átomos en dirección al eje c ($A_{\perp}$). Sin embargo, cuando la estructura HCP es ideal ($a/c \approx 1.6$), entonces $A_{\perp} \approx A_{\parallel}$, y la expresión toma exactamente la misma forma que la mencionada anteriormente [12].

sistema de dipolos recibe el nombre de campo desmagnetizante $\mathbf{H}_{\text{demag}}(\mathbf{r})$. Así pues, para derivar una descripción continua del sistema, el campo $\mathbf{H}_{\text{demag}}$ al no provenir de corrientes eléctricas implica inmediatamente que $\nabla \times \mathbf{H}_{\text{demag}} = 0$ y, por tanto, se debe satisfacer necesariamente la ecuación de Poisson para el potencial magnético U_{demag} ($\mathbf{H}_{\text{demag}} = -\nabla U_{\text{demag}}$) dada por

$$\nabla^2 U_{\text{demag}}(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}).$$

Además, la solución integral para el potencial toma la forma

$$U_{\text{demag}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' + \frac{1}{4\pi} \oint_{\partial V} \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \hat{n}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS',$$

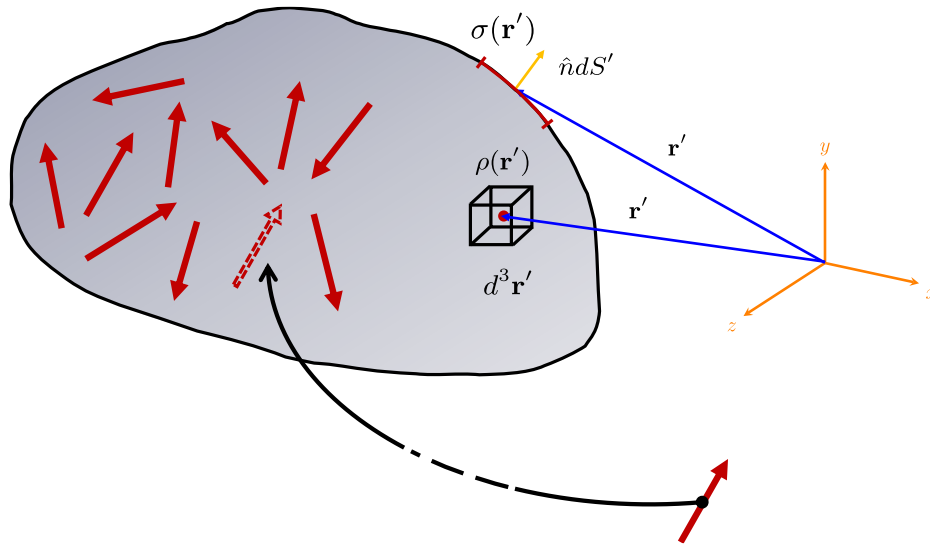


Figura 2. Energía magnetostática de un cuerpo magnético.

donde $\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r})$ y $\sigma(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \hat{n}$ es la densidad volumétrica y superficial de dipolos magnéticos, respectivamente (Figura 2). Esta energía representa el trabajo mecánico requerido para construir un cuerpo magnético, trasladando cada momento magnético, uno tras otro, desde el infinito hasta su posición final, formando así un medio magnético continuo. Por otro lado, la energía magnetostática almacenada en el sistema es

$$\begin{aligned} \phi_{\text{demag}} &= -\frac{\mu_0}{2} \int_V \mathbf{H}_{\text{demag}}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \\ &= \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' + \frac{\mu_0}{2} \oint_{\partial V} \sigma(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') dS'. \end{aligned}$$

Ahora bien, utilizando la identidad $\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = \psi \nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla \psi$, para un campo vectorial $\mathbf{A}$ y un campo escalar ψ , se puede reescribir la energía potencial magnetostática, para el caso de una magnetización uniforme $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_0$, de la siguiente manera

$$U_{\text{demag}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \mathbf{M}_0 \cdot \nabla' \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d^3 \mathbf{r}'.$$

Por medio de $\mathbf{H}_{\text{demag}} = -\nabla U_{\text{demag}}$ se puede determinar una expresión analítica para el campo dada por

$$\mathbf{H}_{\text{demag}}(\mathbf{r}) = -\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{r})\mathbf{M}_0 \quad \text{con} \quad \hat{\mathcal{N}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \nabla' \nabla' \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d^3 \mathbf{r}'.$$

donde $\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{r})$ se le conoce como factor de desmagnetización el cual depende exclusivamente de la geometría del nanohilo. Para algunos casos particulares:

- **Esfera:** $\hat{\mathcal{N}}_{11} = \hat{\mathcal{N}}_{22} = \hat{\mathcal{N}}_{33} = 1/3$.
- **Cilindro infinito a lo largo del eje z:** $\hat{\mathcal{N}}_{33} = 0$ y $\hat{\mathcal{N}}_{11} = \hat{\mathcal{N}}_{22} = 1/2$.
- **Lámina infinitamente larga en el plano xy:** $\hat{\mathcal{N}}_{11} = \hat{\mathcal{N}}_{22} = 0$ y $\hat{\mathcal{N}}_{33} = 1$.

Para todos los casos las componentes no diagonales las entradas de $\hat{\mathcal{N}}$ son nulas Así, la densidad de energía magnetostática está determinada por

$$\phi'_{\text{demag}} = \frac{\mu_0}{2} \mathbf{M}_0 \cdot \hat{\mathcal{N}} \mathbf{M}_0.$$

Para un cilindro infinitamente largo, esta densidad se reduce a

$$\phi'_{\text{demag}} = K_{\text{sh}} \sin^2 \theta \quad \text{con} \quad K_{\text{sh}} = \frac{\mu_0 M_s^2}{4} \quad (2)$$

donde K_{sh} es la constante de anisotropía de forma y θ es el ángulo cenital medido desde el eje z . Cuando $\theta = \pi/2$, la magnetización está completamente dispuesta de manera perpendicular al eje de simetría del nanohilo, alcanza máximo valor de densidad energía K_{sh} (Figura 3a). Mientras que, cuando $\theta = 0$, la magnetización está completamente alineada a lo largo de la longitud de nanohilo, lo que corresponda de mínima energía (Figura 3b). En este último, la densidad de carga superficial es menor que en el primero.

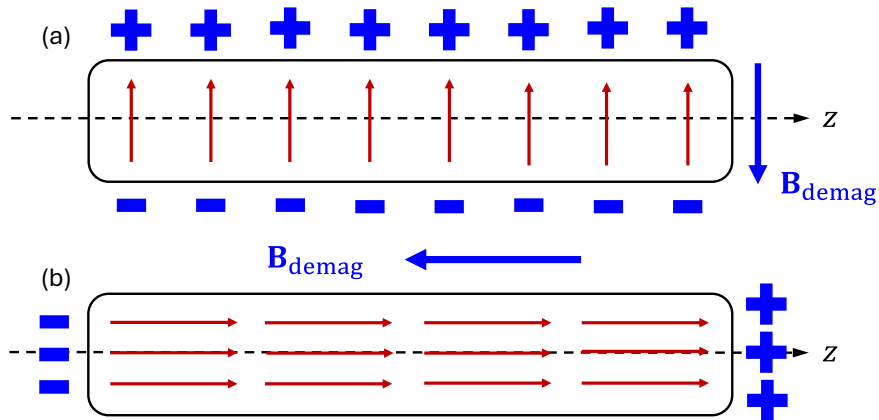


Figura 3. a) Configuración que maximiza la energía magnetostática ($\theta = \pi/2$). b) Configuración que minimiza la energía magnetostática ($\theta = 0$).

En términos generales, la energía magnetostática favorece las configuraciones magnéticas que minimizan las cargas magnéticas. En particular, en los bordes de la muestra, la magnetización tiende a orientarse paralela a la superficie.

3.1.2.3 Energía de anisotropía magnetocristalina

El fenómeno de magnetización espontánea en los sólidos está fuertemente relacionado con la anisotropía de las propiedades intrínsecas de estos. Así pues, la anisotropía magnetocristalina describe la tendencia de la magnetización a orientarse a lo largo de direcciones espaciales bien definidas. Esta preferencia del posicionamiento de la magnetización en el espacio es producto de las interacciones entre los átomos y su ordenamiento en una estructura regular y ordenada. Asimismo, se dice que un sólido cristalino tiene un “eje fácil” si es fácilmente magnetizable en esa dirección, esto es, que el campo magnético necesario para llevar al sistema a la saturación es particularmente menor respecto de direcciones a las que llamaremos “ejes duros”. Además, si tiene una única dirección de fácil magnetización diremos que tiene una anisotropía uniaxial. Dicho término de densidad de energía puede ser expresado de forma general como [14]

$$\phi'_{\text{anis}} = K_0 + \sum_{i \neq j} K_{ij} \gamma_i(\mathbf{r}) \gamma_j(\mathbf{r}) + \sum_{i,j,k} K_{ijk} \gamma_i(\mathbf{r}) \gamma_j(\mathbf{r}) \gamma_k(\mathbf{r}),$$

donde las constantes K son características del sistema.

3.1.2.3.1 Simetrías cúbicas

Cuando el ordenamiento de los átomos son del tipo SC (cúbica simple), BCC (cúbica centrada en el cuerpo) o FCC (cúbica centrada en las caras), los sólidos cristalinos poseen varias direcciones en las cuales la magnetización tiende a orientarse (Figura 4). La densidad de energía magnetocristalina para este tipo de arreglos geométricos de átomos se puede representar como

$$\phi'_{\text{anis}}^{\text{cub}} = K_0^{\text{cub}} + K_1^{\text{cub}} (\gamma_1^2(\mathbf{r}) \gamma_2^2(\mathbf{r}) + \gamma_1^2(\mathbf{r}) \gamma_3^2(\mathbf{r}) + \gamma_2^2(\mathbf{r}) \gamma_3^2(\mathbf{r})) + K_2^{\text{cub}} \gamma_1^2(\mathbf{r}) \gamma_2^2(\mathbf{r}) \gamma_3^2(\mathbf{r}) + \dots$$

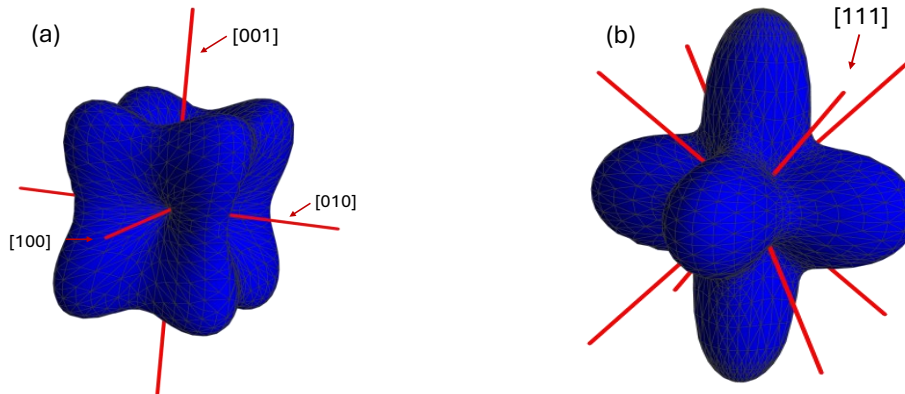


Figura 4. Direcciones de fácil magnetización y superficie de energía de anisotropía magnetocristalina para las estructuras SC, BCC y FCC. a) $K_1 > 0$. b) $K_1 < 0$.

3.1.2.3.2 Simetrías hexagonales

Para estructuras cristalográficas tipo HCP (hexagonal compacta), dependiendo de las posiciones relativas entre los átomos se puede originar una orientación única preferencial para la magnetización (anisotropía uniaxial) o que esté completamente contenida en algún plano (Figura 5). La densidad de energía magnetocristalina para este tipo de estructuras toma la forma de

$$\phi'_{\text{anis}} = K_0^u + K_1^u(\gamma_1^2(\mathbf{r}) + \gamma_2^2(\mathbf{r})) + K_2^u(\gamma_1^2(\mathbf{r}) + \gamma_2^2(\mathbf{r}))^2 + \dots$$

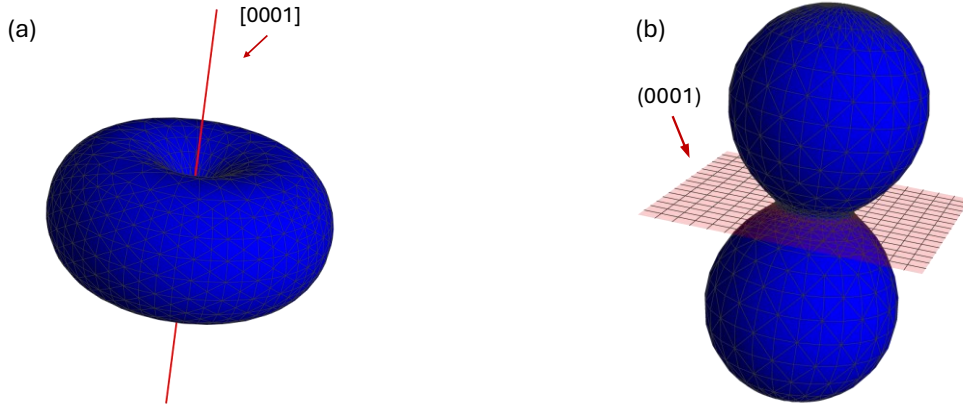


Figura 5. Direcciones de fácil magnetización y superficie de energía de anisotropía magnetocristalina para las estructuras HCP. a) $K_1 > 0$. b) $K_1 < 0$.

Si se escoge hábilmente el sistema de referencia y solo se conserva los términos de primer orden, podemos escribir las densidades de energía ϕ'_{anis}^u y $\phi'_{\text{anis}}^{\text{cub}}$ como

$$\phi'_{\text{anis}}^u = -K_1^u(\hat{u} \cdot \hat{m})^2, \quad (3)$$

$$\phi'_{\text{anis}}^{\text{cub}} = K_1^{\text{cub}}[(\hat{c}_1 \cdot \hat{m})^2(\hat{c}_2 \cdot \hat{m})^2 + (\hat{c}_1 \cdot \hat{m})^2(\hat{c}_3 \cdot \hat{m})^2 + (\hat{c}_2 \cdot \hat{m})^2(\hat{c}_3 \cdot \hat{m})^2],$$

donde el vector unitario $\hat{u}$ está asociado al eje fácil de anisotropía uniaxial, mientras que la terna de vectores unitarios $\hat{c}_1$, $\hat{c}_2$ y $\hat{c}_3$, mutuamente perpendiculares, corresponden a cada uno de los ejes de fácil magnetización para simetrías cúbicas. Se observa que la energía magnetocristalina se minimiza cuando la magnetización se orienta a lo largo de los ejes fáciles de las estructuras cristalinas, y juega un papel fundamental en la formación de configuraciones micromagnéticas exóticas.

3.1.2.4 Energía de Zeeman

La interacción entre dipolos magnéticos μ_i con un campo magnético externo $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ lleva a estos a reacomodarse en nuevas configuraciones de tal forma que el nuevo ordenamiento magnético sea un estado que minimice y equilibre las interacciones internas del sistema.

Naturalmente, el término de energía resultante corresponderá a la adición discreta de las contribuciones individuales entre el dipolo y el campo aplicado dada por

$$\phi_{\text{Zeeman}} = -\sum_i \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}.$$

Con el fin de obtener una extensión al continuo de la energía Zeeman, se considera que la magnetización espontánea $d\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M}d^3\mathbf{r}$, donde $d\boldsymbol{\mu}$ es el momento magnético neto en algún elemento diferencial de volumen $d^3\mathbf{r}$ del sistema y reemplazamos la suma por la integral (Figura 6) [15]. De este modo, se obtiene que

$$\phi_{\text{Zeeman}} = -\mu_0 \int_V \mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (4)$$

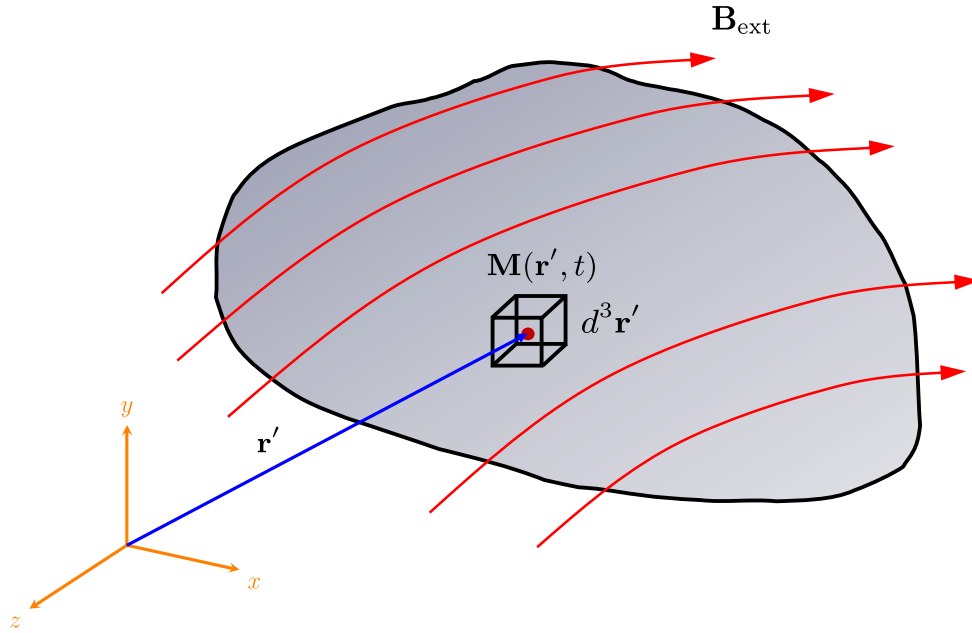


Figura 6. Medio magnético sometido a un campo magnético externo.

Puesto que la energía Zeeman es controlada por el campo magnético externo, esta se minimiza cuando la magnetización del material se alinea completamente con la dirección de $\mathbf{B}_{\text{ext}}$, una condición que se alcanza cuando un material se encuentra en un estado de saturación, luego de aplicar un campo magnético externo muy intenso.

Dependiendo de la interacción que domine en el sistema, los momentos magnéticos tienden a ordenarse de manera tal que la energía total del sistema se minimice. Esto implica que, mientras algunas contribuciones logran ser minimizada, otras deben incrementar (Tabla 2). Este ordenamiento está determinado por la competencia entre diversas interacciones. Como resultado, la estructura final que adopten que los momentos será un equilibrio de efectos que estabilicen su ordenamiento en el tiempo.

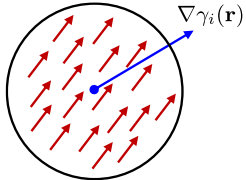
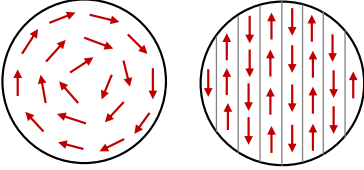
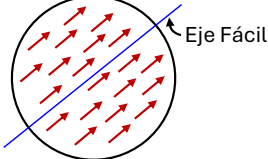
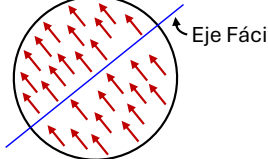
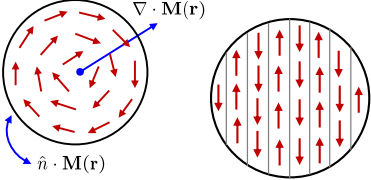
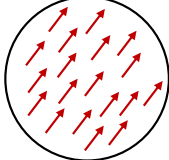
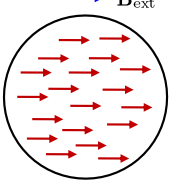
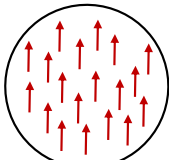
Tipos de energía	Configuración que minimiza la energía	Configuración que maximiza la energía
Energía de intercambio $-A \sum_i [\nabla \gamma_i(\mathbf{r})]^2$		
Energía de anisotropía $-K_1^u (\hat{u} \cdot \hat{m})$		
Energía magnetostática $\frac{\mu_0}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$ $+ \frac{\mu_0}{2} \oint_{\partial V} \sigma(\mathbf{r}') U_{\text{demag}}(\mathbf{r}') dS'$		
Energía Zeeman $-\mu_0 \int_V \mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$		

Tabla 2. Comparación energética de distintas configuraciones magnéticas. Tabla adaptada de [16].

3.1.3 Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert

La ecuación central en la teoría del micromagnetismo para la descripción de la dinámica de la magnetización es la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Esta ecuación describe la evolución en el tiempo de la magnetización espontánea, lo que permite el estudio en detalle de la formación de volúmenes de magnetización uniforme o dominios magnéticos y la correspondiente microestructura remanente en sistemas magnéticos. La dinámica de la magnetización (Figura 7) se rige por la ecuación [17,18]

$$\frac{d\mathbf{M}(\mathbf{r},t)}{dt} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} [\mathbf{M}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r},t) + \alpha \mathbf{M}(\mathbf{r},t) \times (\mathbf{M}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r},t))],$$

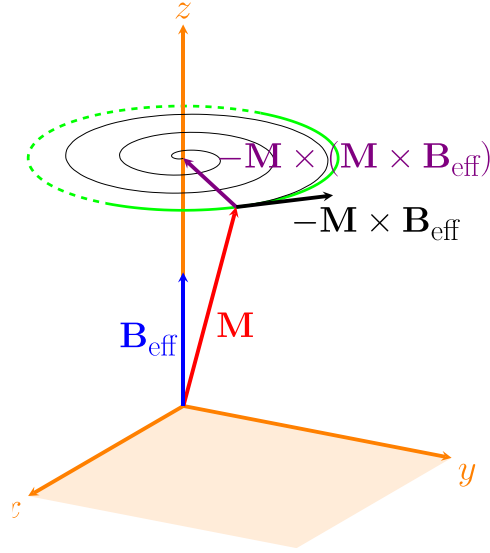


Figura 7. Representación de la evolución en el tiempo de la magnetización del sistema. El primer término de la ecuación LLG corresponde a un movimiento de precesión alrededor $\mathbf{B}_{\text{eff}}$, mientras que el segundo término describe la disipación presente en el medio.

donde γ es la relación giromagnética del electrón, α es el parámetro de disipación de Gilbert y $\mathbf{B}_{\text{eff}}$ el campo magnético efectivo el cual puede ser expresado de la forma

$$\begin{aligned} B_{\text{eff},i} &= -\frac{\partial \phi'_i}{\partial \gamma_i} \\ &= \frac{2A}{M_s} \nabla^2 \gamma_i - \frac{\partial}{\partial \gamma_i} (\phi'_{\text{anis}} + \phi'_{\text{el}}) + B_{\text{demag},i} + B_{\text{ext},i}. \end{aligned}$$

La ecuación LLG a cero absoluto, $T = 0$ K, es completamente determinista, esto es, que la dinámica de la magnetización sujeta a condiciones iniciales fijas describirá un movimiento concreto y bien definido. Sin embargo, cuando la temperatura toma un valor finito, $T \neq 0$ K, la ecuación LLG pasa a ser de carácter estocástico debido a las fluctuaciones térmicas que son introducidas debido a la temperatura. Así, se inserta en las ecuaciones LLG un campo magnético estocástico $\mathbf{B}_{\text{therm}}$ para describir este efecto térmico. Siguiendo a Brown, el campo efectivo discretizado producido por las fluctuaciones térmicas queda [19,20]

$$\mathbf{B}_{\text{therm}} = \boldsymbol{\eta} \sqrt{\frac{2\alpha k_B T}{M_s \gamma V \Delta t}},$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, Δt es el paso de tiempo, V es el volumen de la celda y $\boldsymbol{\eta}$ es un vector aleatorio extraído de una distribución normal estándar cuyo valor cambia después de cada paso de tiempo.

El parámetro de disipación de Gilbert, presente en las ecuaciones LLG, es una cantidad adimensional que caracteriza el grado de disipación del medio. Este parámetro engloba los mecanismos de interacción entre los constituyentes de los materiales. En materiales

ferromagnéticos comunes, el valor de α no es constante, sino que presenta una dependencia compleja y no lineal con la magnetización. Sin embargo, en el campo de simulaciones micromagnéticas, por simplicidad numérica, se toman valores constantes del parámetro de disipación entre 0.01 y 1, con el fin de simplificar numéricamente la integración de las ecuaciones LLG y reducir los tiempos de cálculo [21]. Este parámetro puede ser determinado de manera aproximada por modelos como el de Kamberský [22], el cual define el parámetro de disipación en términos de la correlación de torque espín-orbita en el modelo de un electrón. De acuerdo con el trabajo realizado por Kikuchi en 1956 [23], el tiempo mínimo de inversión de la magnetización se alcanza, para una esfera, cuando el parámetro de Gilbert es 1. Para valores mayores a 1, el proceso de inversión se ralentiza, mientras que valores inferiores, la magnetización oscila más rápido, pero de tal forma que tarde más tiempo en llegar a su estado de equilibrio. En el presente trabajo se emplea un valor de 1 para el parámetro de Gilbert.

3.2 Software de simulaciones micromagnéticas: *mumax*³

El paquete de software *mumax*³ [24], acelerado por GPU, resuelve numéricamente las ecuaciones LLG mediante el método de diferencias finitas, el cual puede ser basado en campo o basado en energía. El primero consiste en buscar la solución numérica a través de una evaluación directa de las componentes del campo efectivo $\mathbf{B}_{\text{eff}}$, bajo la restricción de las condiciones de frontera; el segundo da prioridad a la minimización de la energía libre de Gibbs y esta se calcula directamente de la magnetización discretizada, mientras que el campo efectivo se deriva de la energía resultante [25]. Este trabajo de investigación se desarrolló mediante una combinación de ambos enfoques. De la gran variedad de sub-métodos que ofrece este software, se empleó el método de Dormand-Prince para las simulaciones dinámicas, y el método de RK23 para las simulaciones estáticas de la microestructura remanente. Este software de simulaciones micromagnéticas experimenta una mejora significativa en su rendimiento neto al mejorar las prestaciones de la tarjeta gráfica NVIDIA con la que se opera (Figura 8). *Mumax*³, al ser un software acelerado por GPU, con un foro activo y especializado para la resolución de dudas técnicas [26], representa una opción sólida en el campo de las simulaciones, frente a sus homólogos que corren por CPU (por ejemplo, OOMMF, el software de referencia). En particular, en el presente trabajo se empleó una NVIDIA GeForce RTX 4090 para la realización de las simulaciones, tarjeta gráfica que nos brinda un alto poder de cálculo, operando cerca de 1210 millones de celda por segundo (rendimiento medido para una simulación 2D que contiene 4 millones de celdas).

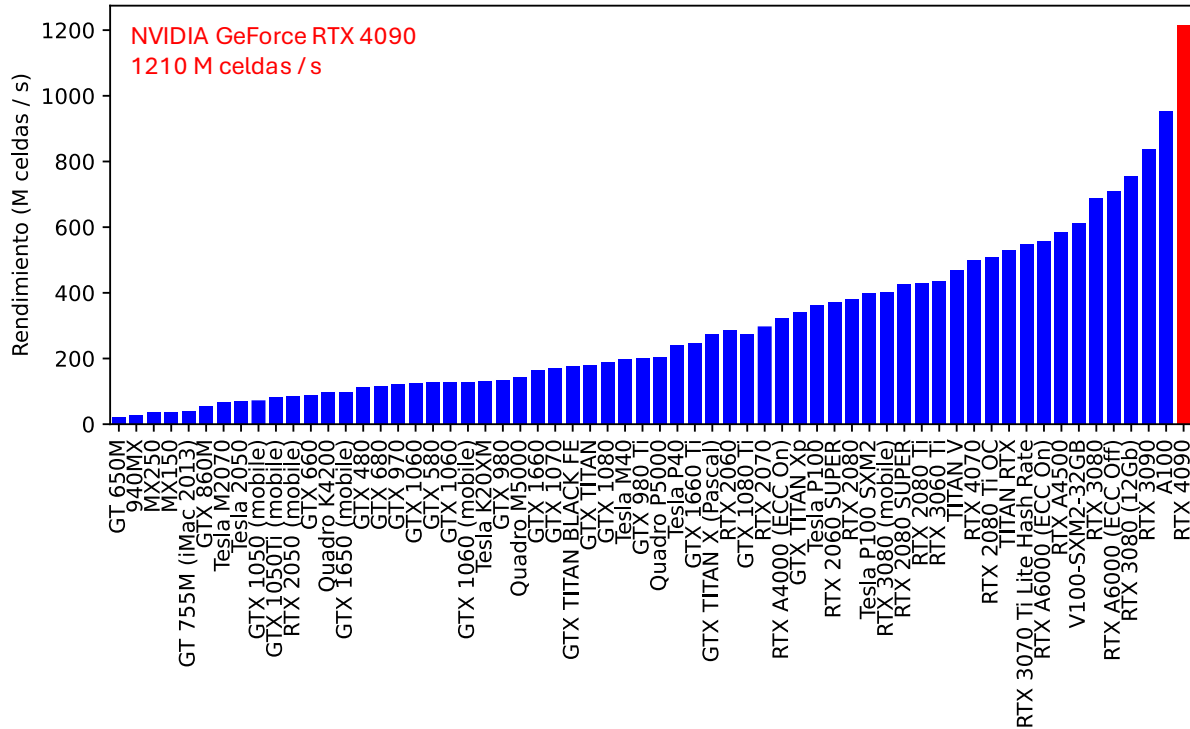


Figura 8. Rendimiento en millones de celdas por segundo en función de la tarjeta de video empleada. La gráfica se construyó con ayuda de los datos sacados del repositorio oficial de mumax³ en GitHub [27].

3.3 Nanohilos ferromagnéticos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$

La presencia de vórtices magnéticos transversales (TMV, por sus siglas en inglés) en nanohilos ferromagnéticos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, fabricados con un eje de anisotropía magnetocristalina orientado casi perpendicular al plano paralelo al eje simetría del nanohilo cilíndrico, representan un estado remanente estable el cual es totalmente caracterizado por las ecuaciones de Landau-Lifshitz y Gilbert (LLG) [6,10,18]. A través de experimentos realizados por holografía electrónica (técnica que permite obtener imágenes magnéticas de nanoestructuras usando un microscopio electrónico de transmisión, TEM, por sus siglas en inglés), Andersen y colaboradores [6,10] mostraron como nanohilos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, de 70 nm de diámetro, se pueden generar estados remanentes compuestos por cadenas de TMV si se emplean campos magnéticos de saturación aplicados perpendicularmente, o vórtices magnéticos longitudinales (LMV, por sus siglas en inglés) separados por paredes de dominio quiral (CDW, por sus siglas en inglés) si se emplean campos magnéticos de saturación paralelos al hilo. Los TMV están repartidos longitudinalmente a lo largo del nanohilo (región C2 de la Figura 9a), en donde el flujo magnético rota alrededor de ejes fijos equidistantes y de quiralidad alternante (Figura 9b). En este sistema, conviven dos fases cristalográficas: HCP y FCC, donde se emplea una aleación de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ con poca concentración de Ni para orientar el eje fácil uniaxial, propio de la estructura HCP, perpendicular al eje del nanohilo

(Figura 9c). Al sobreponer las imágenes a) y b) se evidencia que esta configuración de vórtices se presenta exclusivamente cuando la estructura es HCP (Figura 9d).

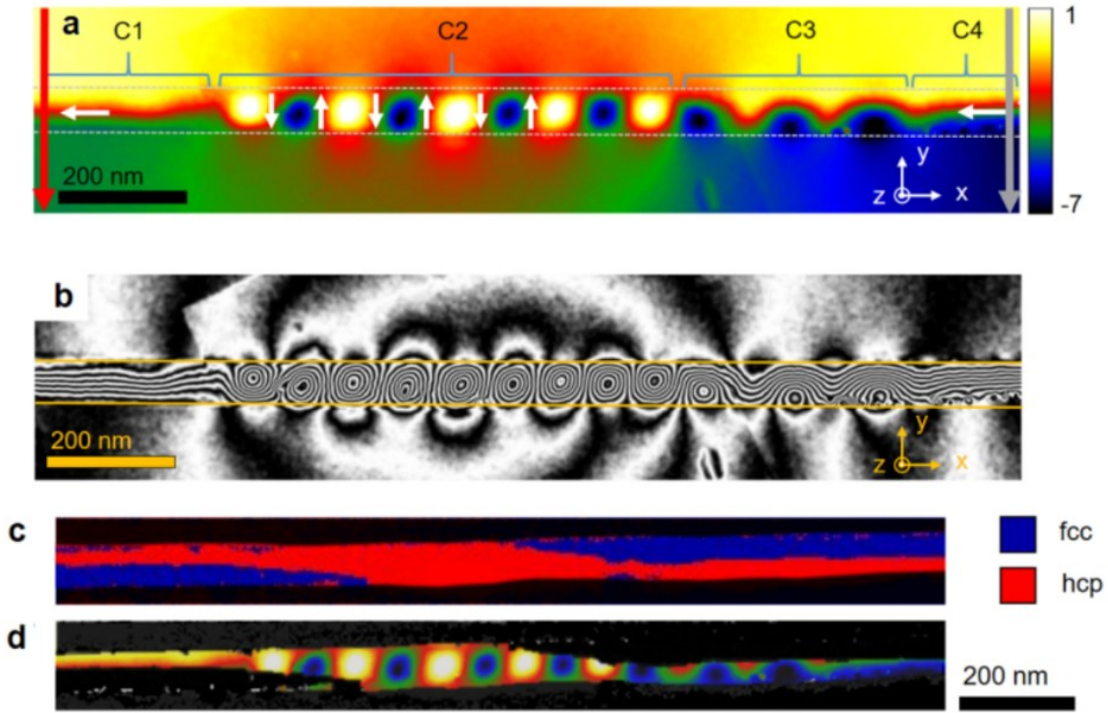


Figura 9. Imágenes TEM obtenida sobre un nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ individual: a) imagen holografía electrónica del cambio de fase de la onda electrónica que atraviesa la muestra por la presencia de campos magnéticos, b) imagen holografía electrónica del flujo magnético, c) imagen ASTAR para identificar la estructura cristalina local a lo largo del nanohilo, d) imagen compuesta por la superposición de a) y c) en donde solo la fase HCP es visible [10].

La formación de cadenas de vórtices transversal, así como estados de vórtices longitudinales, fueron modelados computacionalmente por Andersen y colaboradores [6,10], donde dichas configuraciones sólo aparecían en regiones del nanohilo con estructura HCP con anisotropía magnetocristalina transversal, guardando total coherencia con lo observado experimentalmente (ver Figura 10). Sin embargo, dichas simulaciones micromagnéticas sólo consideraron dos escenarios posibles: (a) formación de la cadena de TMV por la aplicación de un campo magnético de saturación perpendicular al nanohilo y al plano del eje de fácil magnetización (Figura 10b), (b) formación de estados LMV por la aplicación de un campo magnético de saturación paralelo al hilo (Figura 10d). Tanto los vórtices TMV como los LMV poseen dos propiedades importantes: su quiralidad, que se refiere a la dirección de giro (horaria o antihoraria) de cada vórtice, y su polaridad, que indica la dirección promedio de la magnetización en el centro de cada vórtice. Adicionalmente, las simulaciones fueron realizadas asumiendo una temperatura de 0 K, y no se consideraron los efectos del diámetro del nanohilo en el estado remanente final. Por lo tanto, estos resultados

de simulaciones micromagnéticas no nos permite inferir si existen otras condiciones donde, por ejemplo, podemos obtener cadenas de TMV.

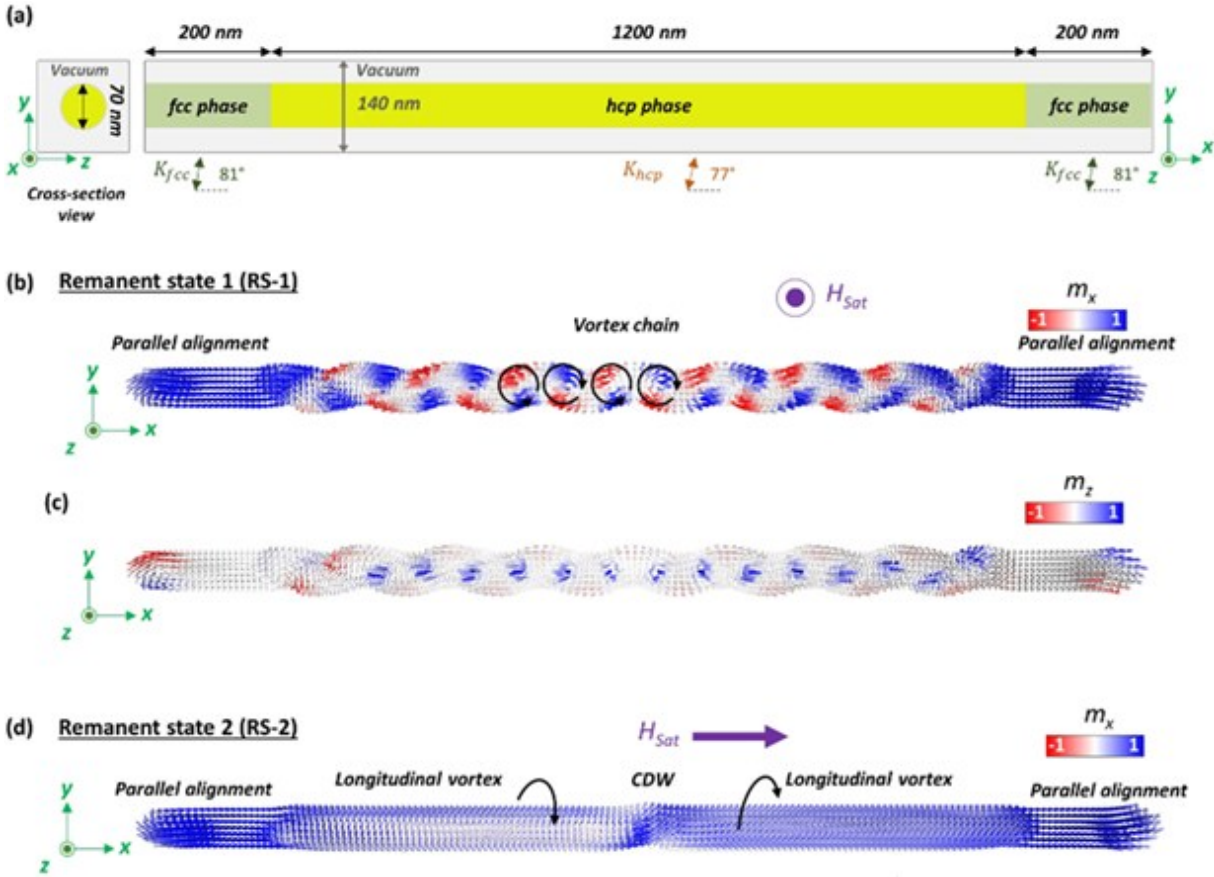


Figura 10. Resultados de las simulaciones micromagnéticas realizada en nanohilos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ con anisotropía transversal. a) Esquema de la geometría y estructura cristalina del nanohilo simulado. b) y c) formación de cadena VTM por la aplicación de un campo magnético de saturación perpendicular al nanohilo. d) formación de LMV por la aplicación de un campo magnético de saturación paralelo al nanohilo. Figura extraída de [6].

Con el propósito de extender el estudio realizado por Andersen, en este trabajo se realizó un estudio detallado, mediante simulaciones micromagnéticas, sobre en qué otras condiciones podemos obtener TMV. Hemos evaluado el efecto de la orientación del campo magnético de saturación, analizando ángulos intermedios entre orientación paralela y perpendicular al hilo; el efecto de la temperatura realizando simulaciones a 300 K y; el efecto del diámetro del nanohilo. Este estudio ha requerido realizar un amplio número de simulaciones, las cuales sólo son posibles si se emplea el software *mumax*³, gracias a su gran potencial para realizar operaciones computacionales con alta velocidad.

Para estudiar la formación de estados TMV, se realizaron simulaciones micromagnéticas que combinaban el desarrollo de la ecuación dinámica LLG, donde el estado remanente del

nanohilo se alcanzó usando un campo magnético de desexcitación tipo sigmoïdal, y una simulación de minimización de energía estática justo cuando el campo magnético externo se acerca a cero. Como veremos más adelante, este cambio se requirió para obtener resultados similares a los que se obtiene usando el software de referencia OOMMF [28], el cual realiza cálculos mediante CPU, limitando la velocidad de cálculo, pero mejorando la precisión de los resultados finales.

4 Detalles experimentales

4.1 Geometría y parámetros magnéticos

Para el desarrollo de las simulaciones micromagnéticas, nos hemos inspirado en el trabajo desarrollado por Andersen y colaboradores [6,10]. Se estableció un universo de $320 \times 28 \times 28$ celdas, donde cada celda tiene dimensiones espaciales de $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$ (Figura 11), una dimensión que es menor a la longitud de intercambio, l_{ex}^2 , para el sistema (alrededor de 5.1 nm) [6,10,29], una condición que se debe cumplir para poder obtener resultados fiables [24,30,31]. En consecuencia, las dimensiones del universo a simular corresponden a un prisma rectangular de $1600 \times 140 \times 140 \text{ nm}^3$.

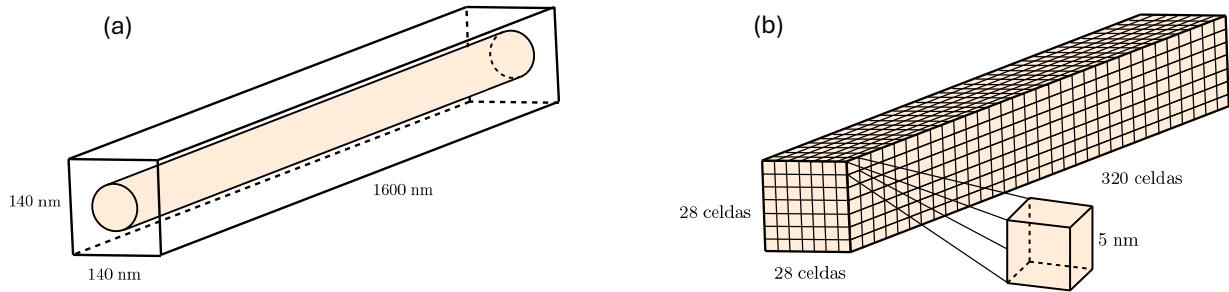


Figura 11. (a) Universo del sistema generado en mumax³. (b) Dimensiones de cada celda del universo.

En medio del universo de la simulación, se diseñó un nanohilo cilíndrico, con un radio de 70 nm y un largo de 1600 nm , mientras que el resto del espacio se deja vacío (Figura 12). Ahora bien, con el objetivo de modelar la coexistencia de fases cristalográficas presente en la aleación de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, el nanohilo se dividió en dos regiones (representadas en verde y azul) con anisotropías magnetocristalina específicas: una anisotropía uniaxial de $K_{\text{HCP}} = 350 \text{ kJ/m}^3$, orientada a 78° para la fase HCP, y una anisotropía cúbica de $K_{\text{FCC}} = 100 \text{ kJ/m}^3$, con los ejes fáciles orientados a 81° y 171° para la fase FCC respecto al eje de simetría del nanohilo, contenidas en el plano xy (el tercer eje de anisotropía es perpendicular a estos dos), direcciones que han sido observadas de forma experimental [32]. Se considera una constante de rigidez de intercambio de 26 pJ/m y una magnetización de saturación de 1273 kA/m para ambas fases [33]. Tanto las dimensiones del nanohilo como la orientación de la anisotropía magnetocristalina son extraídos del trabajo realizado por Andersen y colaboradores [6,10]. Además, la constante de anisotropía de forma (K_{sh}) dada por $\mu_0 M_s^2 / 4$

² La longitud de intercambio l_{ex} describe la importancia relativa de la energía de intercambio con respecto a la energía magnetostática del sistema. Para escalas espaciales menores a este orden de longitud predomina la interacción de intercambio y, por tanto, se puede considerar que los momentos magnéticos están completamente alineados.

para este sistema toma el valor de 509 kJ/m^3 . Finalmente, por simplicidad numérica, se emplea un parámetro de disipación de Gilbert con el valor de 1 en ambas regiones.

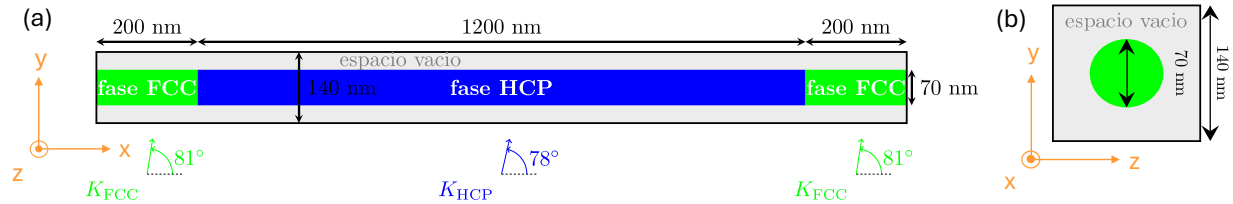


Figura 12. Esquema 2D del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ a simular: (a) corte longitudinal (plano xy) realizado a media altura del eje z . (b) corte transversal (plano yz).

4.1.1 Detalles de las simulaciones micromagnéticas

Las simulaciones micromagnéticas se han desarrollado usando el software *mumax*³, desarrollado por el grupo DyNaMat de la Universidad de Ghent [27]. Este software de código abierto permite realizar simulaciones micromagnéticas por medio de tarjetas gráficas NVIDIA. En particular, en el presente trabajo, se realizaron simulaciones usando una estación de trabajo DELL Precision 3660, perteneciente al grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales, el cual cuenta con una NVIDIA GeForce RTX 4090. Para simular los estados remanentes del nanohilo, se emplea una combinación de dos métodos de simulación:

- (i) Se inicia con una simulación dinámica, donde la ecuación diferencial LLG se resuelve empleando el método de Dormand-Prince (también llamado método RK45), el cual ofrece una convergencia de quinto orden y una estimación de error de cuarto orden utilizada para el control adaptivo del paso del tiempo (es el método predeterminado para simulaciones dinámicas) [24]. Al ser dinámica, el campo magnético de saturación es removido siguiendo una función sigmoide, como se detallará más adelante.
- (ii) Cuando el campo magnético es despreciable, se continua con una simulación estática. En esta etapa, se aplica la función *minimize()*, basada en el método del gradiente conjugado, el cual intenta encontrar el estado de mínima energía libre de Gibbs del sistema [24].

La excitación del sistema mediante un campo magnético externo se modeló con una función sigmoide, empleada para imitar la remoción abrupta del campo magnético y conducir al sistema a remanencia desde un estado saturación magnética (Figura 13). Este proceso se puede separar en tres etapas: la primera etapa consiste en aplicar un campo magnético intenso (2 T) para alinear todos los momentos magnéticos del sistema en una dirección dada, asegurando que el nanohilo alcance un estado de saturación magnética uniforme y estableciendo un punto de partida controlado. La segunda etapa emula un cambio abrupto,

pero físicamente plausible en el entorno magnético del nanohilo mediante la reducción rápida del campo del campo externo. En la tercera etapa, una vez que el campo se ha reducido lo suficiente, el sistema se deja evolucionar hasta que alcanza la remanencia. Las constantes B y t_0 representan la intensidad máxima de campo magnético aplicado al sistema y el corrimiento de la función en el eje horizontal, respectivamente. El tiempo máximo establecido para cada simulación fue de 25 ns . Durante este período, las simulaciones se corren en intervalos regulares discretos de 25 ps, durante el cual el campo magnético aplicado permanece constante dentro de cada intervalo mientras que el sistema evoluciona temporalmente. Dicho campo se actualiza en cada intervalo progresivamente de acuerdo con la sigmoide previamente especificada.

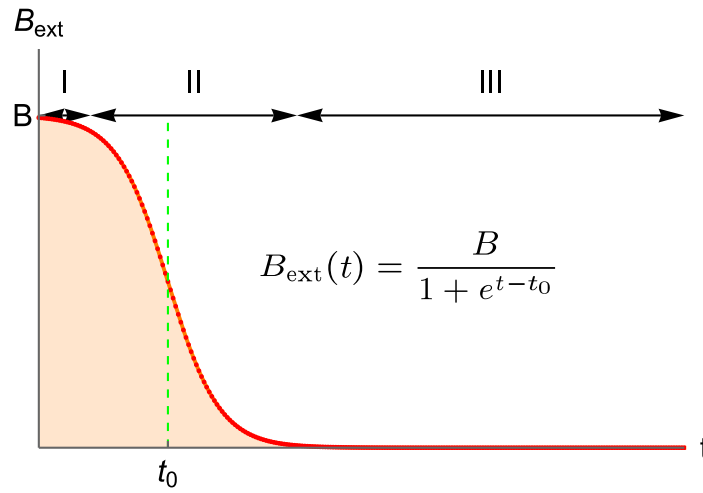


Figura 13. Proceso de excitación y desexcitación para llevar al sistema a remanencia. Este proceso consta de tres etapas: Primera etapa, saturación del sistema; segunda etapa, remoción del campo magnético; tercera etapa, evolución del sistema hasta el estado de remanencia.

Para garantizar que el sistema alcance una microestructura remanente estable, es decir, que alcance su mínimo de energía, se propone un criterio cuantitativo para determinar el instante indicado para alternar entre simulaciones dinámicas (basadas en integración directa de las ecuaciones LLG) y simulaciones estáticas (por minimización de la energía libre de Gibbs). Este criterio se expresa mediante el parámetro P :

$$P = \left[\frac{|\phi_{\text{Zeeman}}|}{|\phi_{\text{anis}}| + |\phi_{\text{demag}}| + |\phi_{\text{ex}}| + |\phi_{\text{Zeeman}}| + |\phi_{\text{therm}}|} \right] \times 100 < 0.1.$$

La cantidad P representa el porcentaje absoluto de energía Zeeman respecto al total de las contribuciones energéticas absolutas del sistema. El criterio establece que, para valores de $P < 0.1$, la influencia del campo magnético externo es suficientemente pequeña como para considerarla despreciable frente a las demás interacciones internas del sistema. Por lo tanto, el uso del criterio basado en P proporciona una metodología sistemática y robusta

para optimizar los cálculos numéricos (Tabla 3), al no permitir que el sistema evolucione un tiempo exageradamente largo para garantizar la remanencia de su estructura y garantizando la convergencia hacia un estado de energía mínima.

Tipo de simulación	Tiempo (min)
Estática	3
Dinámica	1
Mixta	0.78

Tabla 3. Se comparan los tiempos promedio de 100 simulaciones realizadas para cada uno de los tres enfoques para realizar las simulaciones del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$: estática, dinámica y mixta. Las estáticas y dinámicas se desarrollaron exclusivamente usando minimización de energía e integración numérica, respectivamente. Las mixtas implementan el criterio de transición entre simulaciones dinámicas a estáticas.

De este modo, el desarrollo de las simulaciones sigue el esquema ilustrado en la Figura 14 (ver Anexos), el cual detalla los pasos necesarios para modelar el proceso de magnetización del nanohilo. Se empieza estableciendo las características geométricas del nanohilo, así como sus parámetros característicos. A continuación, se excita el sistema mediante un campo magnético dado por una función sigmoide caracterizada por los parámetros B y t_0 . Posteriormente, se simula la dinámica de la magnetización mediante la evolución en el tiempo del sistema continuando el proceso hasta que el criterio de transición, definido por el parámetro P , deja de satisfacerse. Finalmente, cuando el criterio sobre P no se cumple, se emplea el método minimización energía libre de Gibbs hasta consolidar su microestructura remanente, asegurando que alcance su estado de equilibrio energético y se procede a guardar los resultados obtenidos.

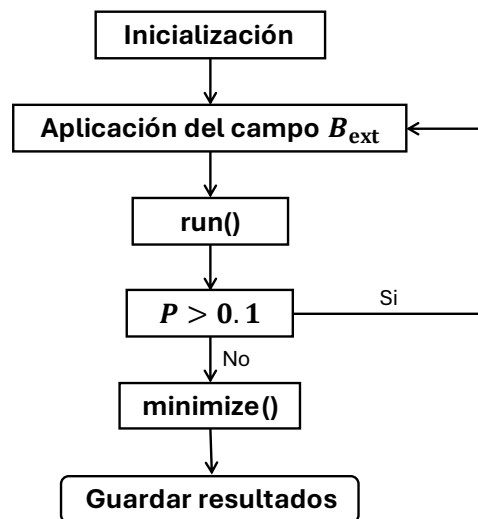


Figura 14. Diagrama de flujo de aplicación de campos magnéticos mediante una función sigmoide.

4.2 Resultados y discusión

4.2.1 Formación de vórtices magnéticos transversales

En la Figura 15 se ilustra el procedimiento utilizado para estudiar los estados remanentes de nanohilos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ con anisotropía transversal. La simulación, realizada a 0 K, comienza con un estado aleatorio del campo de magnetización (Figura 15a). A partir de este estado inicial, se aplica un campo magnético externo de saturación ($B_{\text{ext}} = 2 \text{ T}$) de manera instantánea para excitar el sistema y un parámetro $t_0 = 5$. Esta magnitud de campo magnético, similar al empleado experimentalmente por [6,23], es lo suficientemente alto como para reorientar la magnetización del nanohilo en la dirección del campo aplicado. Bajo esta condición de saturación del sistema (asumiendo que 2 T la magnetización se orienta completamente perpendicular al nanohilo en toda su extensión), y teniendo en cuenta los parámetros magnéticos y geométricos del nanohilo, es posible calcular analíticamente los valores de cada una de las energías micromagnéticas del sistema (Tabla 4) a través de las ecuaciones 1, 2, 3 y 4. Al tener valores similares entre los calculados analíticamente, y los que proporciona *mumax*³, podemos ver una gran similitud entre los resultados, lo que confirmaría que el sistema, a 2 T, se encuentra en un estado de saturación.

Tipo de energía	Teórico ($\times 10^{-15} \text{ J}$)	Simulación ($\times 10^{-15} \text{ J}$)
Anisotropía	0	-0.000738102
Desmagnetización	3.13418	3.101149
Zeeman	15.677	15.77355
Intercambio	0	0.0031053287

Tabla 4. Comparación de resultados entre valores calculados teóricamente y los obtenidos numéricamente para un nanohilo cilíndrico de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ saturado con un campo de 2 T perpendicular al plano donde yace el eje fácil de anisotropía uniaxial.

Para analizar el estado remanente de nanohilos magnéticos, comúnmente se emplean simulaciones micromagnéticas estáticas, cuyos resultados suelen coincidir con los obtenidos experimentalmente [6,10,34,35]. Sin embargo, al realizar una simulación estática en *mumax*³, la cual parte de un estado de saturación perpendicular al plano donde se encuentra el eje fácil (eje z) (Figura 15b), se obtiene un estado remanente formado por dos LMV con quiralidad opuesta, separados por un CDW (Figura 15c). Este resultado difiere del reportado por [6,10], donde simulaciones micromagnéticas estáticas realizadas con OOMMF—un software de referencia que realiza cálculos computacionales mediante CPU—muestran la formación de una cadena de TMV sobre la sección del nanohilo con estructura HCP, resultado que es coherente con lo observado experimentalmente.

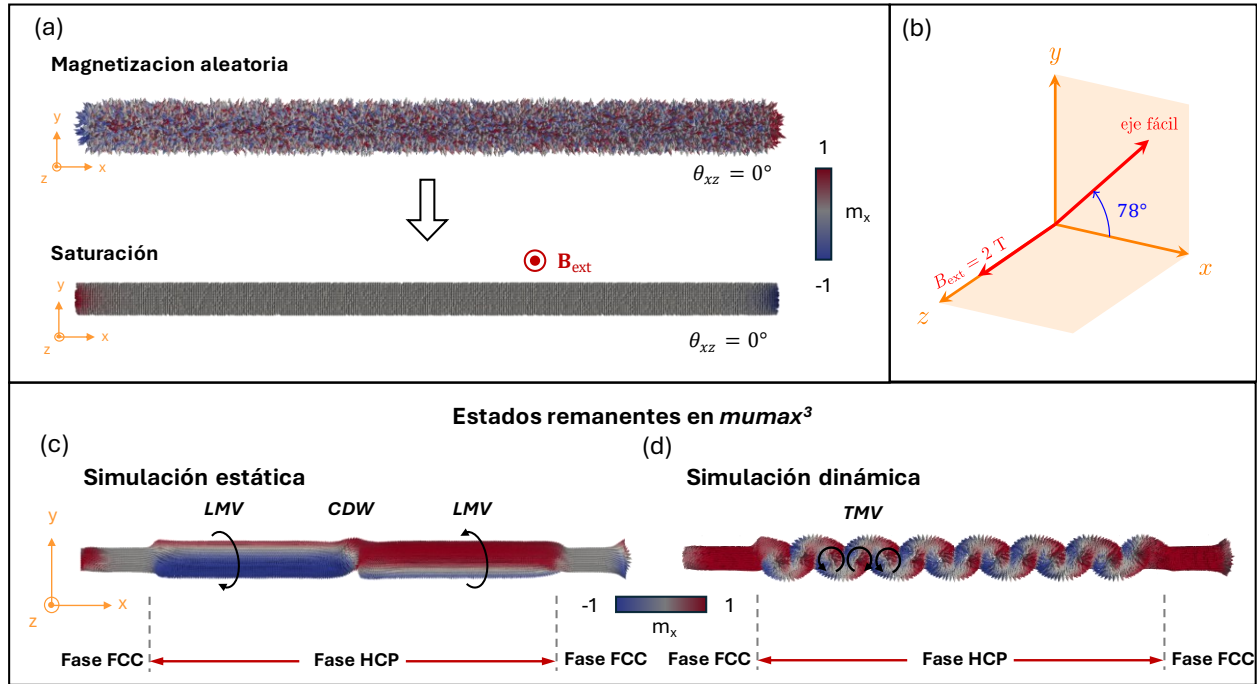


Figura 15. (a) Representación 3D del proceso de saturación de la magnetización del sistema a 2 T. (b) Representación vectorial de la dirección del campo de saturación aplicado (B_{ext}). Representación 3D del estado remanente luego de realizar una simulación (c) estática y (d) dinámica usando *mumax*³. Los colores de las representaciones 3D indican la componente x la magnetización.

No obstante, al realizar simulaciones dinámicas en las que remoción del campo magnético externo sigue la función sigmoide descrita en la sección 4.1.1, se obtiene la cadena de TMV esperada (Figura 15d). Estos resultados demuestran que, para estudiar los estados magnéticos remanentes en nanohilos de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ utilizando *mumax*³, es necesario emplear simulaciones dinámicas para obtener resultados confiables y coherentes con los datos experimentalmente.

La Figura 16a incluye un código QR que enlaza a una animación donde se observa la evolución del campo vectorial de magnetización del nanohilo a medida que disminuye B_{ext} . Para valores de B_{ext} mayores a 0.73 T, vemos como el sistema prácticamente no evoluciona, manteniendo el estado de saturación inicial (Figura 16b). A partir de $B_{ext} = 0.73$ T, se inicia la formación de TMV en los extremos de la sección con estructura HCP (Figura 16c), mientras que en el centro del nanohilo aparecen estados metaestables e irregulares. Cuando B_{ext} alcanza un valor cercano a 0.23 T, la cadena de TMV se termina de formar (Figura 16d). Por debajo de ese valor de B_{ext} , solo se observan pequeñas variaciones en los TMV ubicados en los extremos de la cadena, causadas por el reacomodamiento de la magnetización en las secciones con fase FCC, cuya magnetización tiende a alinearse paralelamente a la longitud del nanohilo.

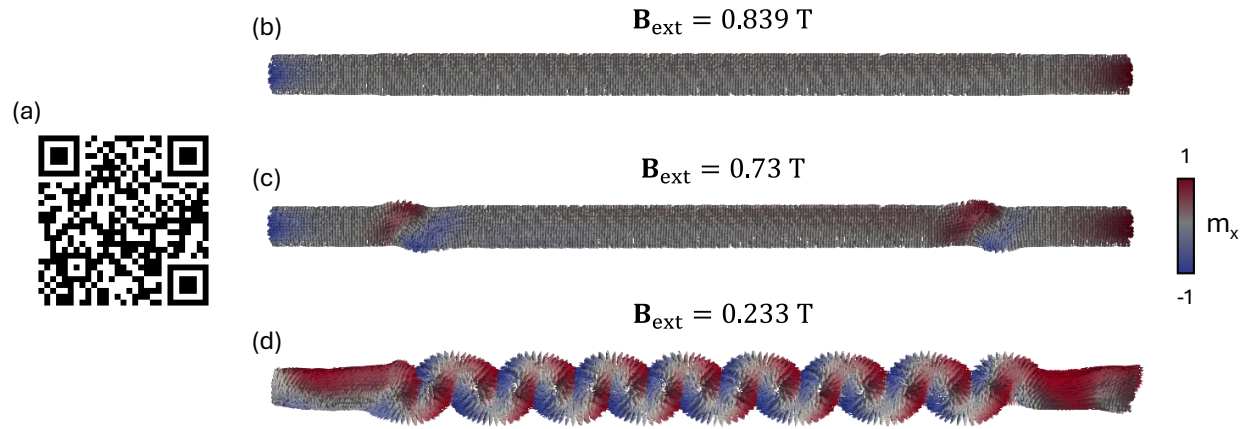


Figura 16. Evolución de la magnetización del nanohilo a medida que disminuye de B_{ext} . a) Código QR que nos enlaza a una animación del proceso. Instantáneas extraídas de la animación cuando B_{ext} alcanza valores de (a) 0.839 T, c) 0.73 T y d) 0.233 T.

La Figura 17 muestra la evolución de las energías micromagnéticas del sistema en función del campo magnético externo. La escala de B_{ext} se representa de forma descendente para mantener la coherencia con la evolución del sistema, que transcurre desde la saturación (2 T) hasta la remanencia (0 T). La Figura 17a muestra que, en la condición de saturación ($B_{ext} = 2$ T), la energía Zeeman (ϕ_{Zeeman}) predomina, alcanzando su valor mínimo en este estado y forzando a la magnetización a alinearse con B_{ext} . A medida que B_{ext} disminuye, ϕ_{Zeeman} aumenta, lo que también causa un aumento en la energía total del sistema (ϕ_t), una tendencia que se mantiene hasta alcanzar la remanencia. Durante la fase inicial de remoción del campo, las energías magnetostática (ϕ_{demag}), de intercambio (ϕ_{ex}) y de anisotropía magnética (ϕ_{anis}) permanecen constantes en sus valores iniciales, lo que indica que el sistema sigue en estado de saturación (ver Figura 16b). Sin embargo, cuando B_{ext} se reduce a aproximadamente 0.73 T, ϕ_{demag} y ϕ_{anis} comienzan a decrecer, mientras que ϕ_{ex} aumenta. En ese punto, se inicia la formación de dominios TMV en los extremos de la fase HCP (ver Figura 16c). El comportamiento decreciente de ϕ_{demag} y ϕ_{anis} , así como el incremento continuo de ϕ_{ex} , se mantiene conforme B_{ext} sigue disminuyendo y tiende a estabilizarse a medida que el sistema se acerca cada vez más a su estado remanente (Figura 17b).

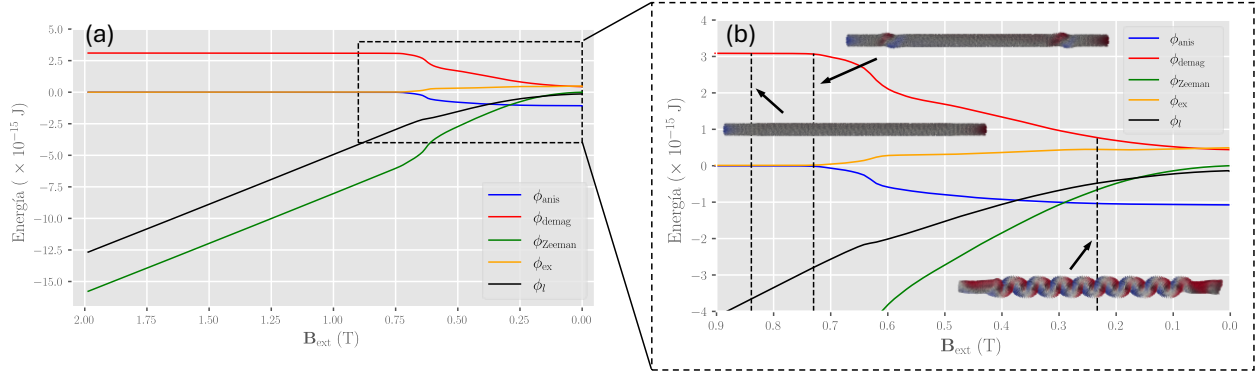


Figura 17. (a) Evolución de las energías micromagnéticas en función del campo externo aplicado, correspondientes a la simulación ilustrada en la Figura 16. (b) Ampliación de la sección destacada en (a).

Al contrastar la evolución de las energías micromagnéticas con la evolución de la magnetización, se puede inferir que la formación de la cadena de TMV contribuye a reducir la energía magnetostática y de anisotropía, aunque provoca un aumento en la energía de intercambio. Estas variaciones en las energías se pueden explicar de la siguiente manera:

- La reducción de ϕ_{demag} se debe a la transición de un estado de saturación, donde la magnetización es completamente perpendicular al nanohilo, a una configuración en la fase HCP, donde las regiones cercanas a la superficie marginal del nanohilo, la magnetización se orientarse paralelamente a lo largo de su eje. Esto es coherente con el hecho de que las cargas magnéticas superficiales están determinadas $\hat{n} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$, lo que reduce la energía magnetostática al minimizar la densidad de cargas superficiales (Figura 18b). Asimismo, en la configuración de vórtice, las cargas volumétricas, determinadas por el término $\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$, disminuyen, lo que también contribuye a reducción de la energía magnetostática (Figura 18a). En la fase FCC, aunque no se puede asumir que tenga una geometría de cilindro infinito, la disposición de la magnetización a lo largo de la longitud del nanohilo reduce su densidad de carga superficial, en contraste con el estado saturado (Figura 18c). Esto es consistente con el término $K_{sh} \sin^2 \vartheta$, que describe la magnetización en la aproximación de magnetización uniforme en un cilindro infinito.
- La reducción de ϕ_{anis} se debe a que la magnetización deja de estar completamente perpendicular al eje de fácil magnetización (energéticamente desfavorable) y adopta una configuración donde casi toda la magnetización se encuentra paralela al plano donde yace el eje de fácil magnetización. Únicamente la polarización de los vórtices se encuentra fuera de este plano y están orientados en la dirección del campo de saturación (Figura 18d). La existencia de estas regiones fuera del plano de anisotropía se explica debido la exposición constante del campo magnético sobre la

microestructura, que “tira” los momentos magnéticos hacia una dirección específica durante toda la remoción del campo.

- El aumento de ϕ_{ex} se produce porque la magnetización pasa de un estado de saturación donde esta se encuentra completamente alineada entre sí y, por tanto, con leves variaciones del término $\nabla\gamma_i(\mathbf{r})$, a una donde se forman cadenas TMV de quiralidad alternante, generando mayores gradientes en la orientación de la magnetización (Figura 18a). Por el contrario, en la fase FCC, la magnetización se dispone completamente a lo largo de la longitud del nanohilo (Figura 18c).

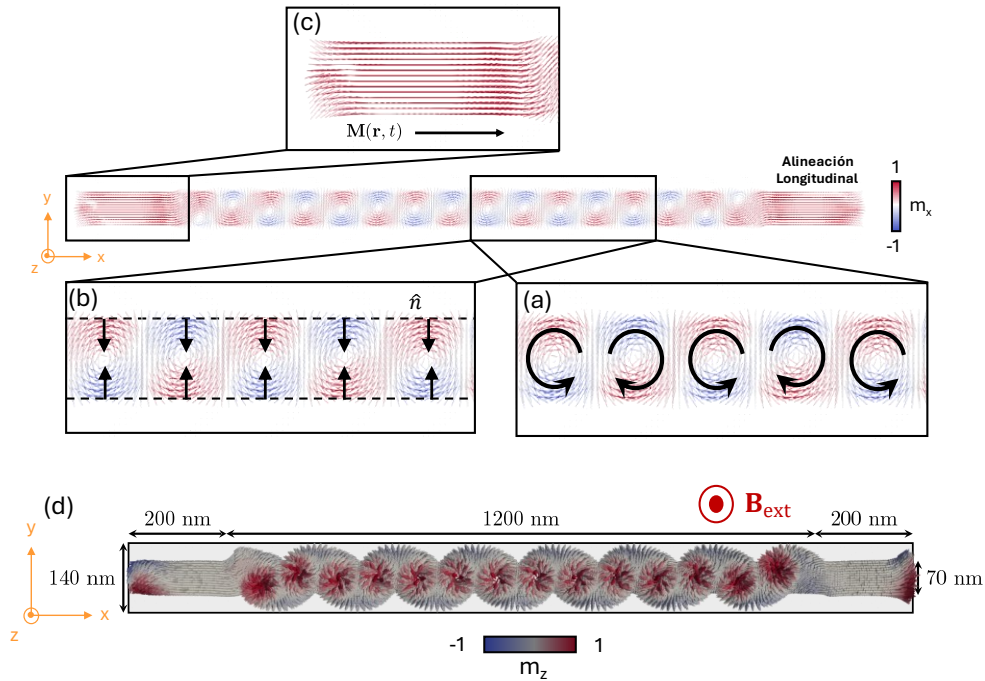


Figura 18. a) Vórtices magnéticos de quiralidad alternada. b) Tendencia de la magnetización a orientarse paralelamente a la superficie marginal del sistema para minimizar energía. c) Esquema de la orientación de los momentos magnéticos en las regiones extremas del nanohilo pertenecientes a la fase FCC. d) Polarización de los TMV orientado paralelamente en la dirección del campo aplicado.

Hasta ahora, la formación de una cadena de TMV se da si el campo de saturación se aplica completamente perpendicular al plano donde yace el eje de fácil magnetización. Sin embargo, y para fines prácticos, es importante conocer si este mismo estado remanente prevalece si el campo de saturación se aplica inclinándolo en otras direcciones.

4.2.2 Variación del ángulo de aplicación del campo magnético externo de saturación

Para analizar el efecto de la dirección de $\mathbf{B}_{ext}$ en la formación de cadenas de TMV, se realizaron simulaciones variando el ángulo del campo magnético externo alrededor del eje z , como se muestra en el diagrama de flujo de la Figura 19 (ver Anexos). Se llevaron a cabo dos tipos de barridos angulares:

- 1- **Barrido longitudinal:** partiendo desde el eje z , se inclina $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ dentro del mismo plano donde yace la longitud del nanohilo (barridos sobre el plano xz).
- 2- **Barrido transversal:** partiendo desde el eje z , $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ se inclina de manera que siempre sea perpendicular a la longitud del nanohilo (barridos sobre el plano yz).

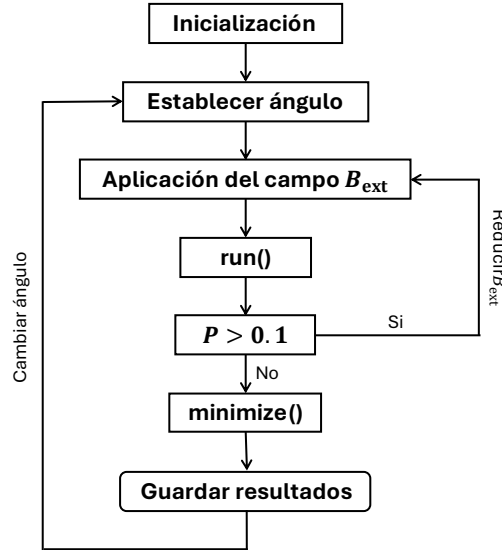


Figura 19. Diagrama de flujo para la variación de orientación del campo magnético aplicado.

Un esquema ilustrando ambos tipos de variación angular del campo son presentados en la Figura 20. Para el barrido longitudinal, el rango de variación fue de -4° y 4° , mientras que, para el barrido transversal, el intervalo se estableció entre -8° y 8° , con un paso angular de 0.08° en ambos casos.

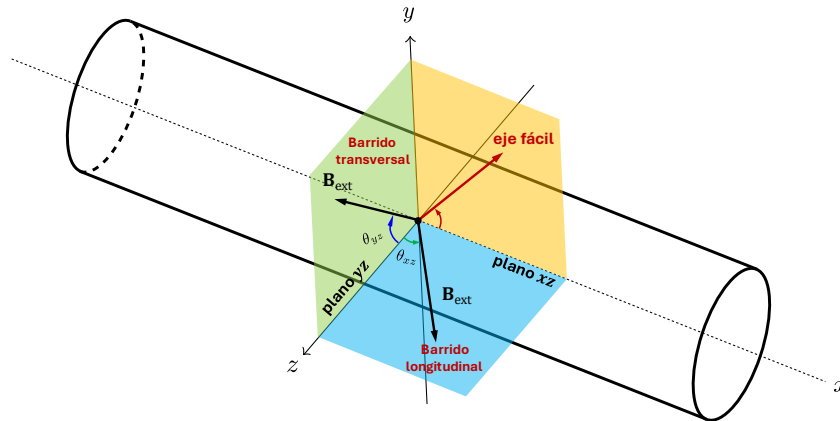


Figura 20. Esquema que ilustra los barridos del campo magnético externo.

En la Figura 21, se muestra los estados remanentes del sistema en función de la dirección del campo de saturación. Debido a la alta simetría del nanohilo, los resultados obtenidos son simétricos con respecto al eje z , por lo que la discusión se centrará en los barridos

angulares positivos. En el caso de los barridos longitudinales (Figura 21a), se observa que la formación de una cadena de TMV a lo largo de toda la fase HCP ocurre para ángulos menores de 2.56° . A medida que el ángulo de inclinación de $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ aumenta, aparecen estados remanentes irregulares en el centro de la cadena, los cuales representan configuraciones intermedias entre una cadena bien definida de TMV y la configuración LMV. Para ángulos iguales o superiores a 3.6° , el estado remanente está compuesto de dos LMV de quiralidad opuesta (Figura 22), separadas por un CDW (estado LMV/CDW/LMV). Este estado es similar al reportado por [6] cuando se emplea un campo de saturación paralelo al nanohilo, lo que sugiere que el estado remanente entre 3.6° a 90° sería el mismo: LMV/CDW/LMV. Resultados similares se obtienen para los barridos transversales (Figura 21b). Sin embargo, para este caso, el rango angular en el que se forma una cadena completa de TMV es mayor (hasta 4.7°), y el ángulo a partir del cual se establece el estado LMV/CDW/LMV se desplaza hasta 6.46° .

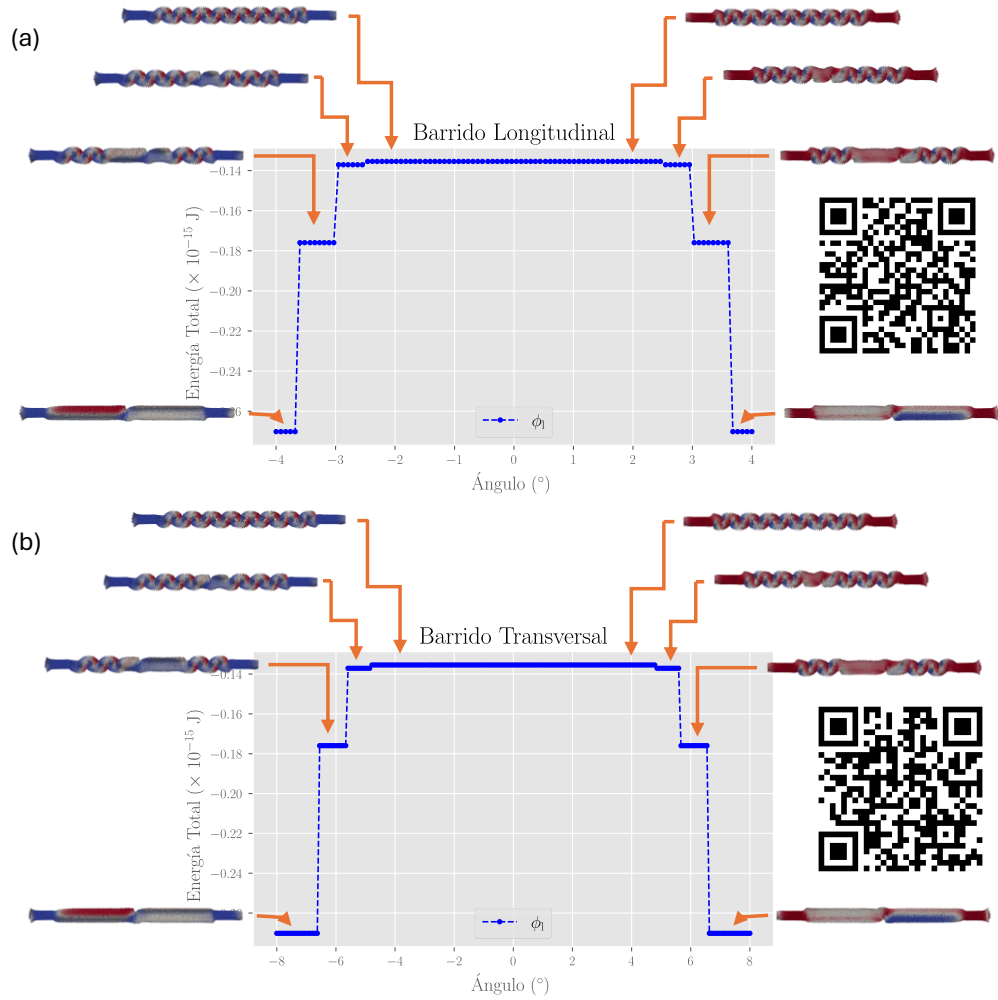


Figura 21. Representación 3D de los estados remanentes representativos y sus energías totales al variar el ángulo del campo de saturación en (a) barridos longitudinales (plano xz) y (b) barridos transversales (plano yz).

Los códigos QR al lado de los gráficos enlazan a animaciones que muestran cómo varía el estado remanente del nanohilo en función del ángulo de saturación.

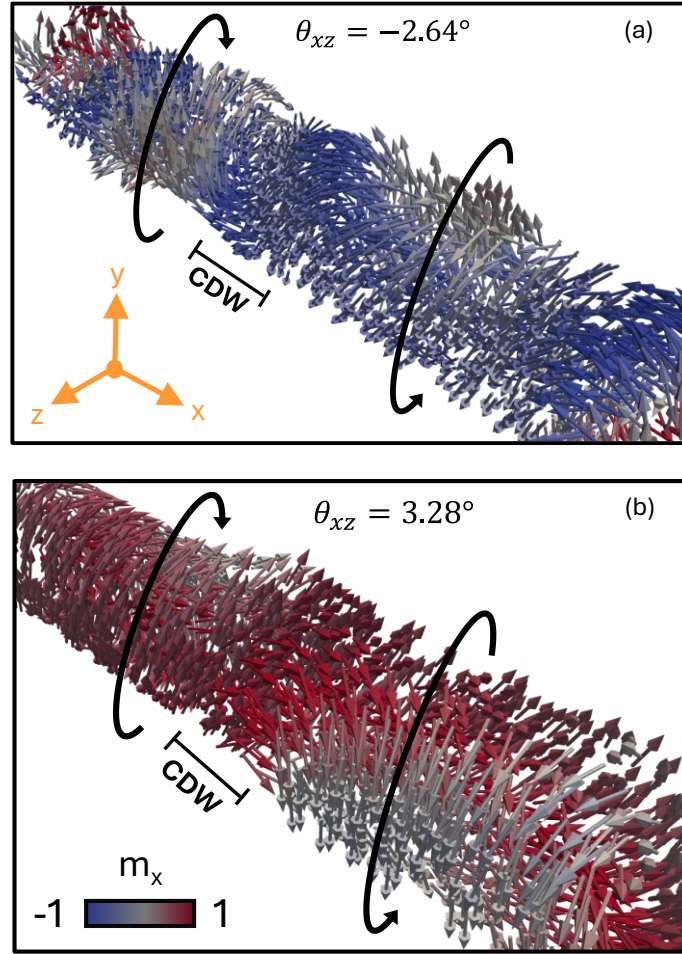


Figura 22. Secciones medias de las estructuras remanentes obtenidas durante el barrido longitudinal para los ángulos: a) $\theta_{xz} = -2.64^\circ$ y b) $\theta_{xz} = 3.28^\circ$.

En la Figura 21, también se presentan los valores de energía micromagnética total de cada estado remanente. Se observa que la cadena completa de TMV es energéticamente más costosa que las demás configuraciones. Además, a medida que emergen estados LMV, el costo energético del sistema disminuye, alcanzado su mínimo en el estado LMV/CDW/LMV. Un análisis más detallado sobre cómo cambian las diferentes energías micromagnéticas (ϕ_{ex} , ϕ_{anis} y ϕ_{demag}) con los estados remanentes obtenidos en función del ángulo se presenta en la Figura 23. Tanto en los barridos transversales como en las longitudinales, se observa que la aparición de estados LMV reduce las energías magnetostática y de intercambio, mientras que la anisotropía magnetocristalina tiende a aumentar. La razón de estos comportamientos energéticos y la asimetría de las ventanas de formación completa de las disposiciones TMV, radica en que para la estructura longitudinal LMV:

- La magnetización se alinea más cerca del eje del nanohilo (eje x), lo que reduce ϕ_{demag} .
- Un barrido longitudinal favorece a que el desalineamiento entre dipolos magnéticos vecinos sea mucho menor al observado en los TMV, lo que reduce ϕ_{ex} .
- Un barrido longitudinal hace que gran parte de la magnetización no se alinee paralelamente al plano donde yace el eje de fácil magnetización, lo que provoca un aumento de ϕ_{anis} .

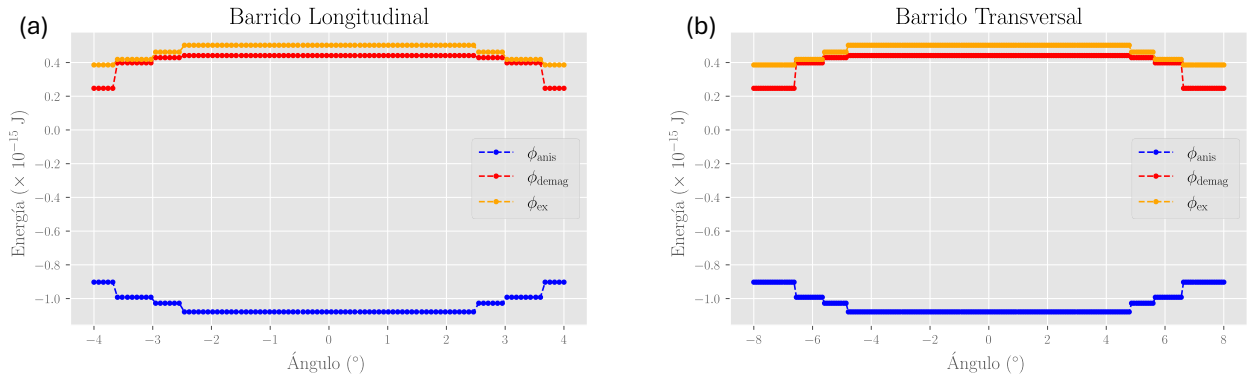


Figura 23. Comportamiento de las energías micromagnéticas en función del ángulo para el a) barrido longitudinal y b) barrido transversal.

Al igual que con la formación de la cadena de TMV (ver Figura 16), se realiza un análisis detallado de la formación del estado LMV/CDW/LMV desde su saturación hasta la alcanzar la remanencia (como ejemplo, se muestra el resultado cuando el sistema se satura usando un ángulo de inclinación 4° , en un barrido longitudinal). En la Figura 24 se presenta un código QR que permite enlazar a una animación del proceso, y también se presenta una secuencia de imágenes que permiten destacar los estados transitorios más significativos del mismo, teniendo en cuenta que la escala de colores (rojo-blanco-azul) está asociada a la componente x de la magnetización:

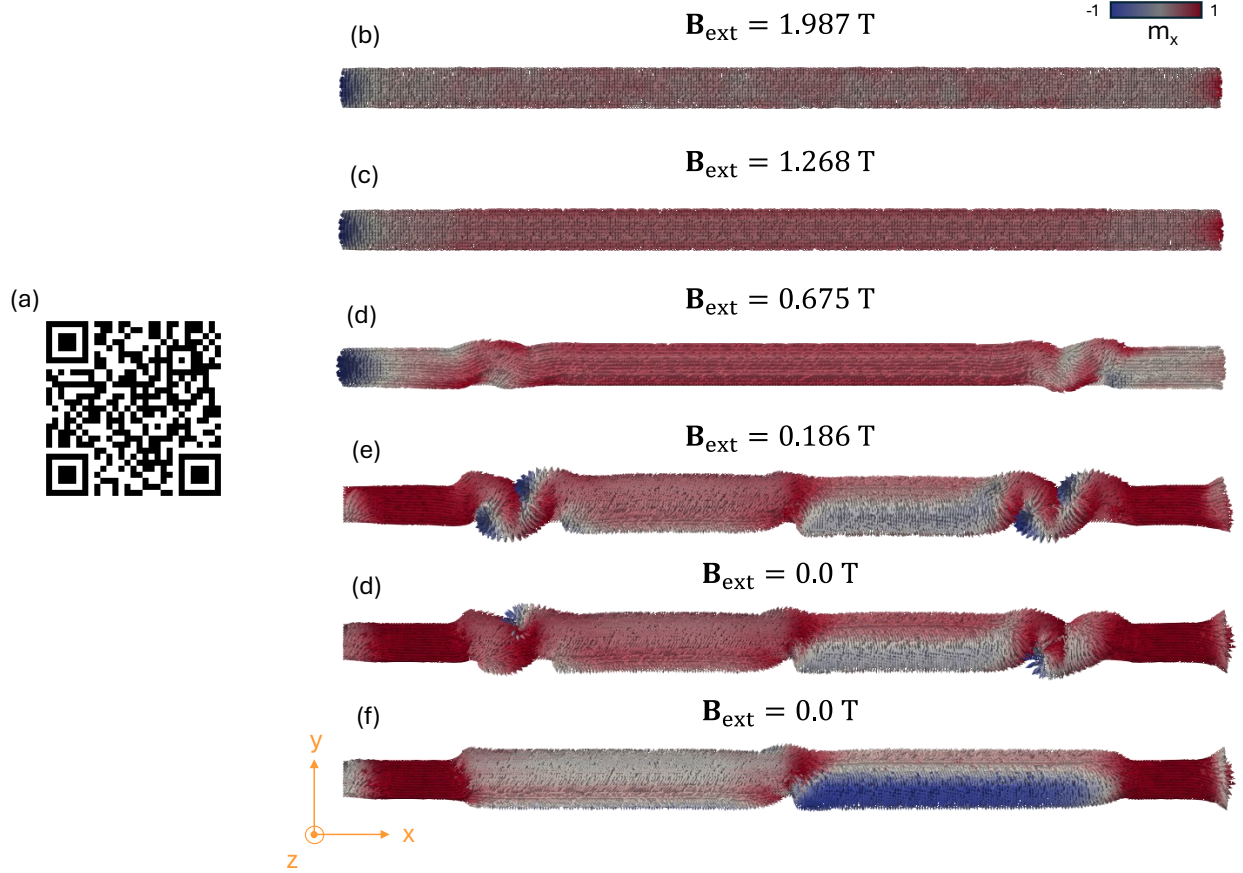


Figura 24. a) Código QR que enlaza a una animación del proceso de formación del estado LMV/CDW/LMV cuando se satura el sistema usando una inclinación de 4° , en un barrido longitudinal. Una secuencia de los estados más representativos de la animación se muestra entre c) y g).

Al partir de saturación, vemos como la magnetización en medio del nanohilo tiene una tonalidad rojiza muy tenue, esto debido a que la magnetización se encuentra inclinada 4° , desde el eje z hacia el eje $+x$ (Figura 24b). A medida que disminuye B_{ext} , vemos como la tonalidad rojiza se hace más intensa (Figura 24c). Esto indica que la inclinación de la magnetización hacia el eje $+x$ se incrementa. Cuando B_{ext} disminuye a 0.6 T aproximadamente, vemos como el nanohilo trata de formar dos estados tipo TMV en los extremos de la sección HCP (Figura 24d), de forma similar a lo que se observó para la formación de la cadena de TMV (ver Figura 16c), mientras que en el centro del nanohilo la magnetización continúa inclinándose hacia el eje $+x$. Cuando B_{ext} toma un valor cercano a 0.19 T, se observa como la magnetización, en el medio del nanohilo, empieza a rotar longitudinalmente (Figura 24e). Dicha rotación se da con dos quiralidades distintas, lo que provoca la formación de un estado inestable en el centro del nanohilo, que sirve para separar los dos estados LMV que se encuentran en proceso de formación. Cuando B_{ext} llega a 0 T, vemos como los dos estados LMV quedan formados, pero persiste la formación de estados tipo TMV en los extremos de la sección HCP. Sin embargo, este estado no permite minimizar

la energía del sistema por lo que, si se deja evolucionar la simulación realizando una minimización de la energía (simulación estática), los estados TMV desaparecen, y se termina de consolidar el estado LMV/CDW/LMV.

Un análisis energético de la evolución de la formación del estado LMV/CDW/LMV se puede realizar a través de las curvas de energías de la Figura 25. Se observa que, en este caso, ϕ_{demag} comienza a disminuir casi inmediatamente después de que B_{ext} empieza a reducirse, mientras que ϕ_{ex} y ϕ_{anis} permanecen prácticamente constantes hasta valores cercanos a 1.2 T. A pesar de que hay diferencias en la forma como las energías evolucionan con la disminución de B_{ext} , tanto en la cadena de TMV como en el estado LMV/CDW/LMV, el estado remanente se alcanza por la reducción de ϕ_{demag} y ϕ_{anis} a expensas de un incremento en ϕ_{ex} . Así pues, un análisis energético de la evolución de las energías no nos permite identificar qué parámetro controla la formación de estados TMV y LMV en la remanencia.

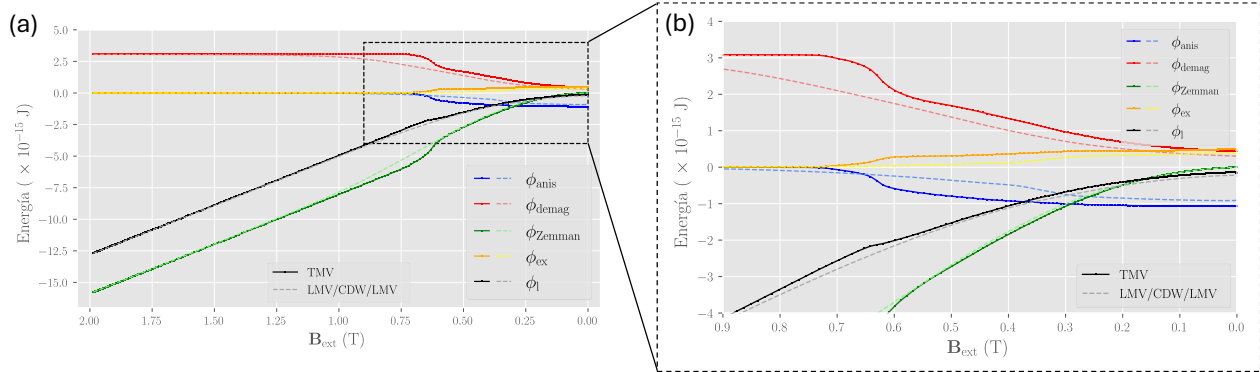


Figura 25. (a) Evolución de las energías micromagnéticas del sistema para el estado remanente LMV/CDW/LMV obtenido al saturar el sistema a 4° respecto al eje z (barrido longitudinal). (b) Ampliación de la sección destacada en (a). Las líneas continuas corresponden a las energías del estado LMV/CDW/LMV, los puntos transparentes son las mismas presentadas en la Figura 17.

Sin embargo, al observar en detalle la evolución de la magnetización, desde la saturación a la remanencia, se puede inferir que la dirección de saturación es el factor clave que controla el tipo de estructura remanente (TMV o LMV):

- La Figura 26a hasta la Figura 26d muestran la evolución en el tiempo de un barrido longitudinal a 8° (la cual se realiza para evidenciar con mayor detalle el efecto de inclinación de la magnetización). Cuando ocurre la formación de estados LMV, como se ve en la Figura 26a, la magnetización inicial se encuentra inclinada respecto al eje perpendicular al plano del eje de fácil magnetización (eje z). Ya sea que el barrido se dé hacia el eje $+x$ o $-x$ (barrido longitudinal), o hacia el eje $+y$ o $-y$ (barrido transversal), ambos escenarios favorecen a que la magnetización prefiera generar

vórtices magnéticos alrededor del eje de simetría del nanohilo (eje x) a medida que se disminuye B_{ext} .

Como se observa en la Figura 26b, a medida que el campo de saturación es removido progresivamente, la magnetización en la fase HCP del hilo experimenta una rotación coherente y continua, alineándose gradualmente en la dirección $+x$, dirección hacia la cual se ha inclinado la magnetización durante la saturación. Este comportamiento colectivo se mantiene hasta alrededor de 0.343 T. Posteriormente, como se muestra en la Figura 26c, cuando el campo disminuye hasta aproximadamente 0.195 T, se observa como la magnetización tiende a disponerse de forma paralela a la superficie marginal del hilo. Esta reorientación genera una redistribución de la magnetización en las regiones vecinas de la superficie del hilo, induciendo un giro en torno a estas zonas y, como consecuencia, reduciendo la carga superficial del sistema. Finalmente, como se ilustra en la Figura 26d, esta evolución da lugar a la formación de una estructura tipo LMV. Naturalmente, polaridad de los vórtices en esta configuración está determinada por la dirección del campo de saturación aplicado, lo que resulta en una orientación promedio (polarización) en la dirección $+x$.

- Cuando ocurre la formación de la cadena de TMV, la magnetización inicial es perfectamente perpendicular (o ligeramente inclinada respecto al eje z) al plano donde yace el eje de fácil magnetización (Figura 26e). A medida que disminuye B_{ext} , por debajo de 0.73 T, tanto ϕ_{demag} y ϕ_{anis} comienzan a controlar la orientación de la magnetización, obligando a que esta se oriente longitudinal o paralelamente al plano de fácil magnetización. Debido a la alta simetría del proceso, energéticamente es igual de favorable que la magnetización se incline desde el eje z hacia el eje $+x$ o hacia el eje $-x$. La formación de un TMV permite que una parte de la magnetización se oriente hacia el eje $+x$ y otra parte, en la misma proporción, se oriente hacia el eje $-x$ (Figura 26f y g). De esta manera, como se observa en la Figura 26h, se genera una especie de estructura de dominio magnético de cierre (remolino) en el plano del eje de fácil magnetización, lo que favorece una minimización de ϕ_{demag} y ϕ_{anis} .

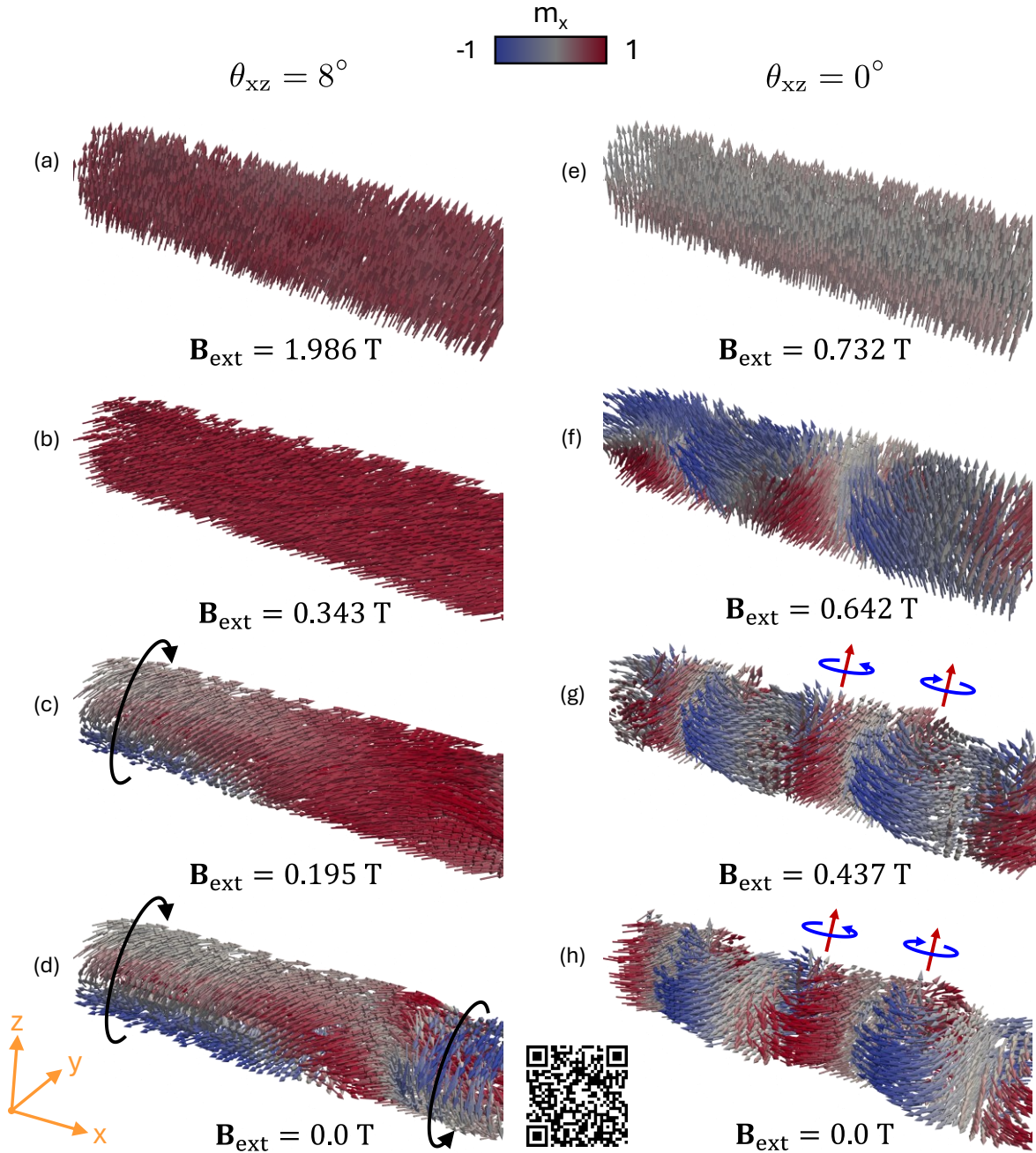


Figura 26. Secuencia representativa de estados visualizados en proyección lateral que ilustran la evolución temporal sistema. Las imágenes a) a d) corresponden a $\theta_{xz} = 8^\circ$, mientras que las imágenes e) a h) muestran la evolución bajo la condición $\theta_{xz} = 0^\circ$. El código QR que enlaza a una animación de la evolución temporal de ambos casos.

Cuando se forma más de un LMV, estos suelen acoplarse de tal manera que la polarización de sus núcleos se encuentre alineada en la misma dirección, mientras que sus quiralidades cambian de forma alternante, separados por un CDW. Por lo tanto, es la historia magnética con la que se inicia el proceso de saturación (dirección del campo de saturación) la que determina el tipo de estado remanente que se puede obtener.

4.3 Simulaciones micromagnéticas a temperatura ambiente

A continuación, se realiza nuevamente el procedimiento que se muestra en la Figura 19, pero incorporando efectos térmicos, esto es, estableciendo una temperatura de 300 K (temperatura ambiente). Debido al costo computacional asociado a la inclusión de las fluctuaciones térmicas en la ecuación LLG, solo se considera un barrido longitudinal de campo magnético a 0 K y 300 K a entre -6° y 6° , usando un paso de 2° . En la Figura 27b, vemos como la cadena de TMV también se logra estabilizar a temperatura ambiente, incluso usando campos de saturación con una inclinación de $\pm 2^\circ$, resultado que es coherente con lo reportado experimentalmente por Andersen y colaboradores [10], quienes realizaron sus estudios de los TMV a temperatura ambiente. Sin embargo, los resultados de las simulaciones a 300 K usando ángulos de inclinación superiores a $\pm 2^\circ$ difieren a los encontrados a 0 K. Mientras que a 0 K logramos estabilizar un único estado LMV/CDW/LMV en este rango, perfectamente simétricos a lo largo de la sección HCP, a 300 K se logran formar varios estados LMV/CDW/LMV de tamaños irregulares; incluso configuraciones remanentes que combinan estados LMV y TMV.

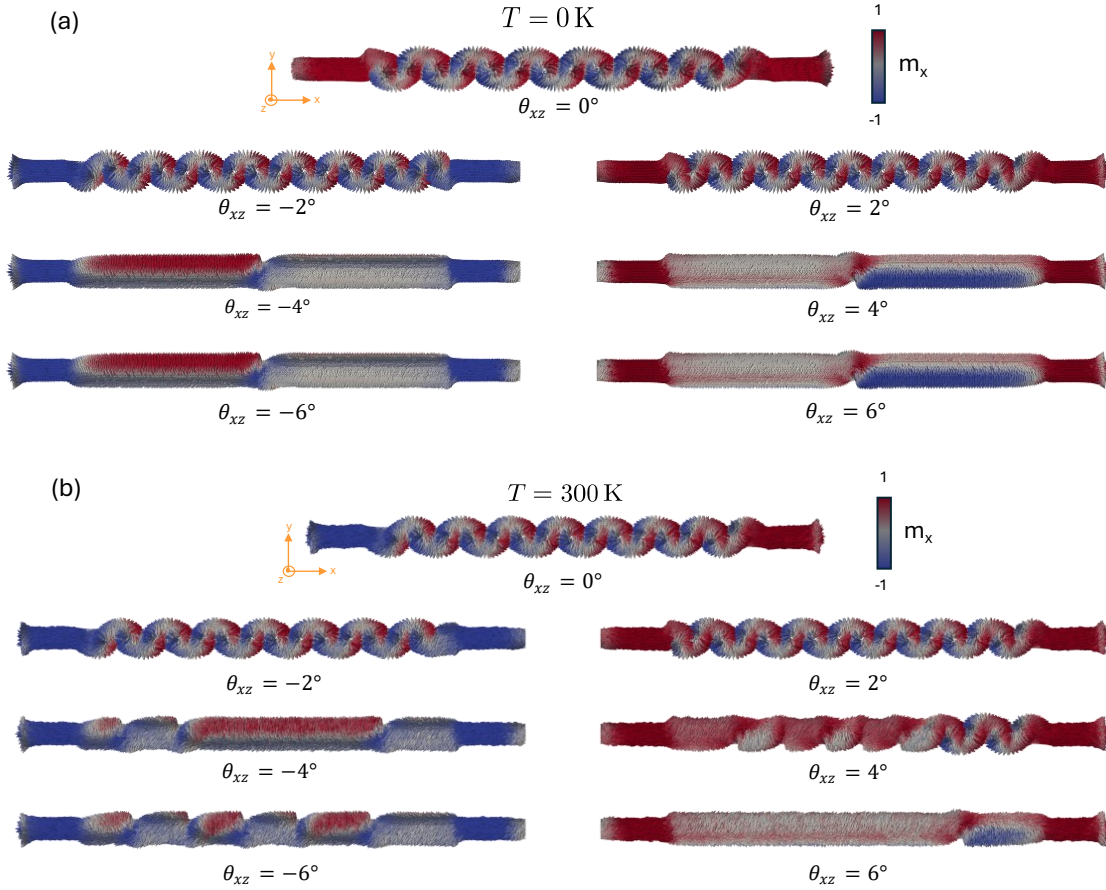


Figura 27. Simulaciones de la estructura remanente en el nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ para distintas orientaciones del campo externo en plano xz a (a) $T = 0$ K y (b) $T = 300$ K.

Adicionalmente, se determina la contribución porcentual absoluta de cada una de las densidades de energía micromagnética del sistema (Tabla 5). Se observa que, si bien los porcentajes de energía térmica son pequeños respecto a las otras energías micromagnéticas (esa es la razón del porqué la mayoría de las simulaciones micromagnéticas reportadas en la literatura se hagan a 0 K), el impacto sobre la estructura remanente final que surge al utilizar ángulos de saturación superiores a $\pm 2^\circ$ es significativo.

Angulo ($^\circ$)	$\% \Phi'_{\text{anis}} $	$\% \Phi'_{\text{demag}} $	$\% \Phi'_{\text{ex}} $	$\% \Phi'_{\text{therm}} $
-6	47.7543	15.5146	31.2382	4.11182
-4	50.3333	14.5669	32.1599	2.93996
-2	47.9341	20.6091	29.6022	1.85458
0	47.2267	20.7479	28.95	3.07546
2	48.1068	20.4831	30.0327	1.3774
4	50.5185	17.0542	31.8491	0.578261
6	47.7543	16.7356	29.9498	5.56029

Tabla 5. Contribución porcentual absoluta de la energía de anisotropía, desmagnetización, intercambio y térmica en el estado remanente en cada ángulo de aplicación de campo magnético.

4.4 Variación del diámetro del nanohilo

Para el estudio de la influencia del diámetro del nanohilo sobre la formación de la cadena de TMV, se realizaron simulaciones micromagnéticas a nanohilos con diámetros que van desde 60 nm a 140 nm, manteniendo su longitud. Las simulaciones se realizaron siguiendo un flujo de procesos similar al mostrado en la Figura 19, y sólo se considera que la saturación del sistema sea completamente perpendicular al plano del eje de fácil magnetización (eje z). Los resultados de dichas simulaciones se presentan en la Figura 28. Vemos como en todos los casos, el estado remanente predominante es la cadena de TMV, la cual se da de forma regular y a lo largo de toda la sección HCP del nanohilo para la mayoría de los casos. En nanohilos con diámetros de 75 nm, 80 nm, 95 nm y 115 nm, se logra ver pequeñas irregularidades en los extremos o a lo largo de la cadena de TMV.

Como vemos en la Figura 28, en la mayoría de los nanohilos se logra formar una cadena de TMV regular que cubre toda la sección HCP del nanohilo. En el caso de los nanohilos de 65 nm y 85 nm de diámetro, se logran formar estados LMV combinados con algunos TMV. Aunque no tenemos una explicación del porqué para algunos diámetros específicos la cadena de TMV no se logra formar, estos resultados demuestran que el diámetro del nanohilo es también un parámetro clave para la formación de cadenas de TMV regulares. Adicionalmente, se ha observado que, al aumentar el diámetro del hilo, la configuración TMV no se restringe únicamente a la fase HCP, como ocurre en el nanohilo de 70 nm, sino que también pueden estar presentes en la fase FCC, particularmente en las zonas adyacentes a

la frontera con la fase HCP. Asimismo, se evidencia que en la fase FCC se inducen rotaciones en la magnetización, en contraposición a una alineación completamente unidireccional.

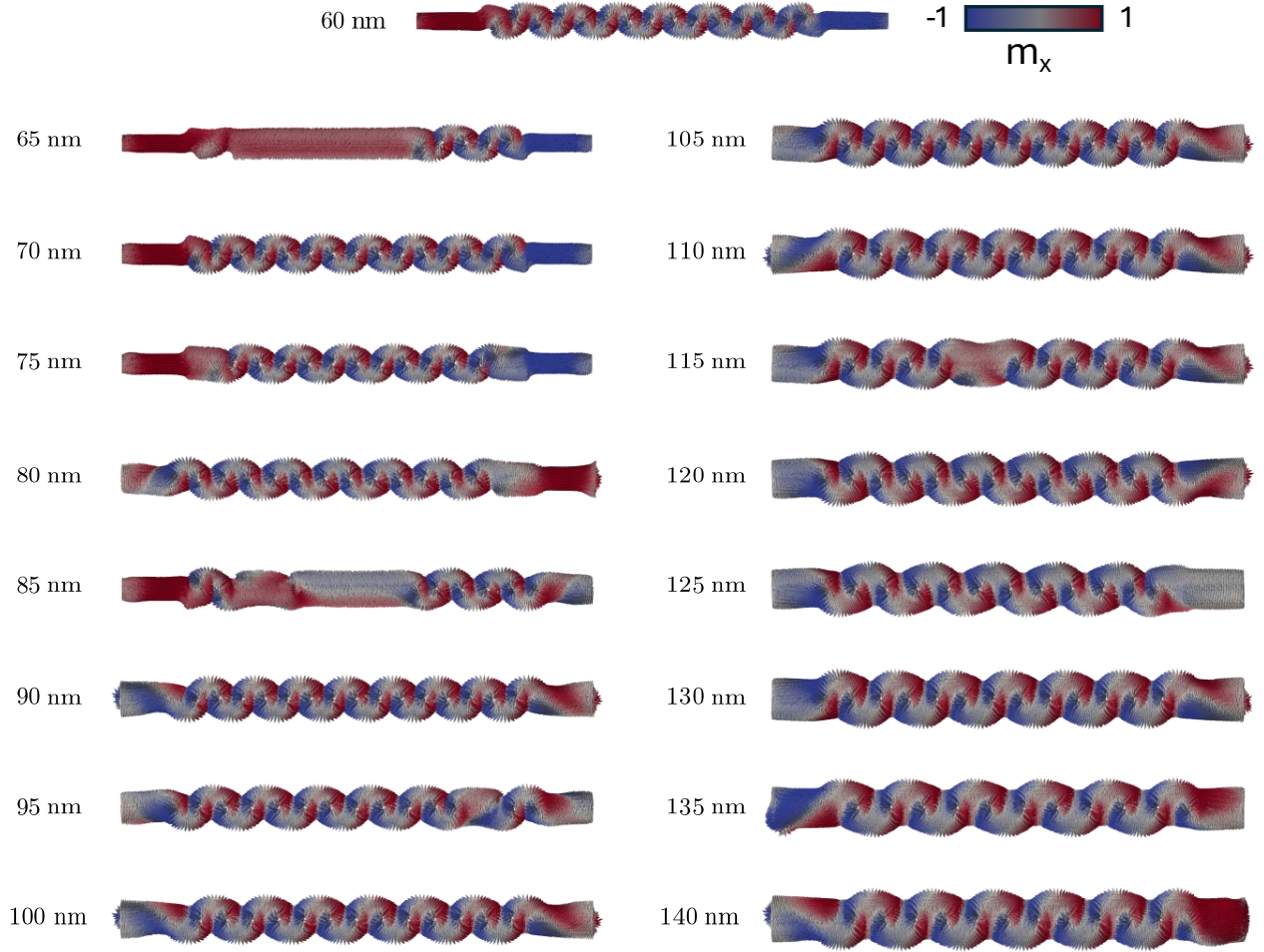


Figura 28. Estado remanente en función del diámetro de nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$.

En la Figura 29 se presentan gráficos de la distancia entre vórtices (o periodicidad) y del número de estos para formaciones completas y bien definidas, como función del diámetro del nanohilo. Las curvas muestran que para nanohilos con diámetros entre 60 nm y 90 nm, tanto la periodicidad como el número de TMV no cambia con el incremento del diámetro. Por encima de 90 nm, podemos ver como la periodicidad de los vórtices decrece a medida que aumenta el diámetro del nanohilo; esta tendencia trae como consecuencia que el número de TMV formados a lo largo de la sección HCP disminuya con el diámetro. Este comportamiento puede explicarse debido a las limitaciones geométricas impuestas por la superficie marginal del nanohilo, ya que la magnetización y, por tanto, el ancho del vórtice, esta transversalmente limitado por la extensión finita del medio magnético, ya que al aproximarse a la superficie la magnetización tiende a orientarse, en promedio, de forma paralela a esta. Coherente con el término de carga superficial dado por $\hat{n} \cdot \mathbf{M}$ (el cual se

anula cuando $\hat{n}$ y $\mathbf{M}$ son perpendiculares). Así, a medida que aumenta el diámetro, también lo hace el espacio antes de que la magnetización se alinee paralelamente a la superficie. Como resultado, los TMV se expanden y ocupan mayor volumen dentro del nanohilo, lo que naturalmente reduce la cantidad total de vórtices presentes en el nanohilo. De manera contraria, al disminuir el diámetro del nanohilo, el número de disposiciones TMV aumentan. Por otro lado, contrario al ancho transversal del vórtice, longitudinalmente los vórtices no tienen esta limitación geometría tan remarcada, ya que pueden estar presentes en toda la extensión de la fase HCP. En consecuencia, las disposiciones de los vórtices tienden a estar más alargados longitudinalmente que transversalmente.

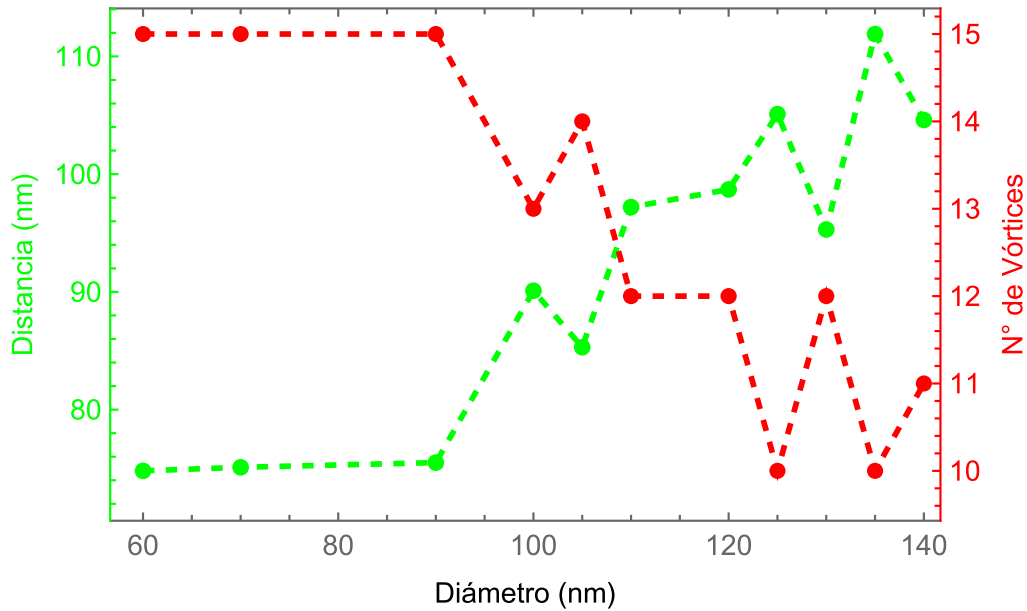


Figura 29. Distancia entre TMV y número de núcleos TMV en función del diámetro del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$. Se han considerado únicamente las disposiciones TMV completas y bien definidas.

4.4.1 Inversión de polaridad individual de vórtice magnético

Hasta ahora, los procedimientos que hemos seguido han mostrado que la cadena de TMV se forma en el nanohilo tengan quiralidad alternante, pero todos polarizados hacia una misma dirección la cual esta determina por la dirección de saturación. Ahora bien, con el objetivo de generar estados binarios en las cadenas de TMV, tal que 0 y 1 estén determinados por la dirección de polarización del vórtice, se planteó realizar simulaciones micromagnéticas sobre la cadena de TMV con el propósito de ver si es posible invertir la polaridad de un TMV específico mediante la aplicación de un campo magnético externo local. En la Figura 30 se presenta el diagrama de flujo de la simulación la cual parte de un estado remanente formado por una cadena de TMV para, posteriormente, aplicar un campo magnético localizado que sea capaz de invertir la polaridad de un TMV.

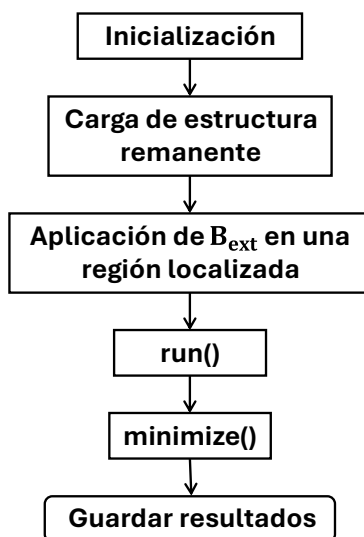


Figura 30. Diagrama de flujo que describe el proceso de inversión de polarización de un núcleo de TMV individual mediante la aplicación de un campo magnético de tipo función paso.

En la Figura 31 se esquematiza los resultados más relevantes de la simulación. Sobre un nanohilo de 70 nm de diámetro, se escoge un TMV sobre el cual se aplica un campo magnético externo localizado de 178 mT, capaz de alterar exclusivamente la polarización de un vórtice específico sin afectar la integridad de los vórtices adyacentes ni comprometer la configuración global de los estados TMV. Al realizar varias pruebas, encontramos que el campo magnético externo debe aplicarse sobre un volumen alrededor del tamaño de un único TMV. Por lo tanto, el campo externo local se aplicó dentro de una ventana rectangular de ancho de 100 nm en eje x y largo de 140 nm en el y . Este campo se modeló, por sencillez, mediante una función paso con una duración de 3 ns en 178 mT y 3 ns en 0 T. La intensidad de campo magnético aplicado fue seleccionada de tal forma que sea el mínimo campo lo suficientemente intenso para cambiar la orientación de la polarización del núcleo. Un aspecto clave de este método es que, tras invertir la polarización del núcleo, se observa que la quiralidad de los vórtices permanece inalterada antes y después de la aplicación del campo magnético.

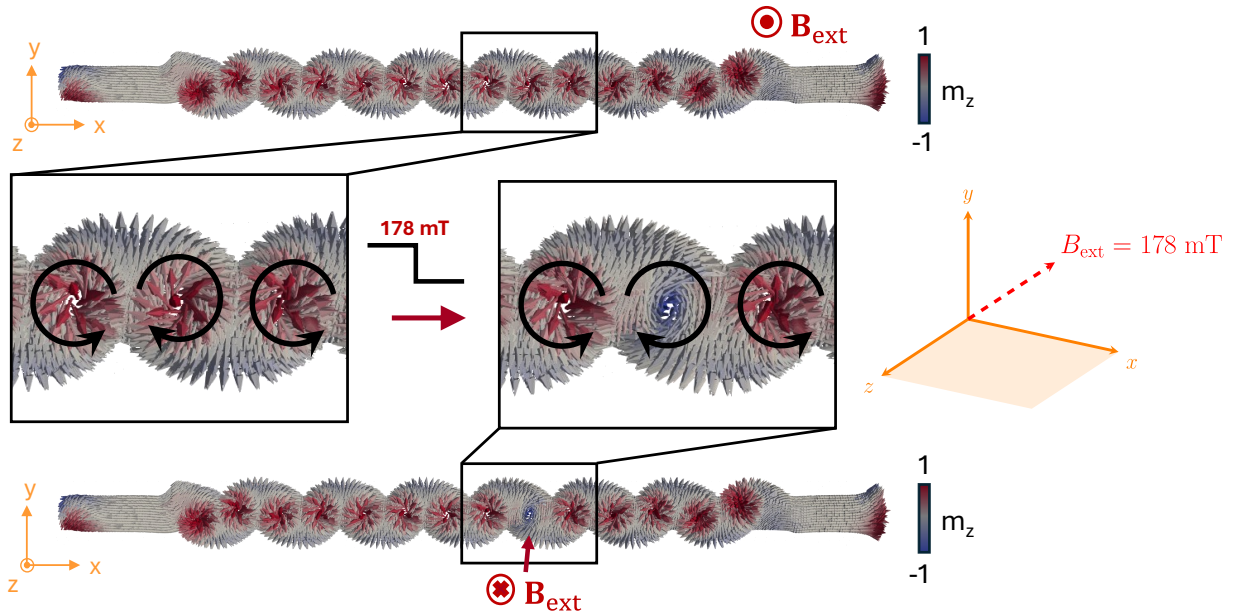


Figura 31. Representación gráfica del estado de quiralidad de los TMV antes y después de la inversión de polarización. Se observa que la quiralidad se mantiene constante, mientras que la polarización del núcleo objetivo se invierte.

Cada dirección de polarización de los núcleos en la cadena TMV puede asociarse con un estado binario (cero o uno), permitiendo así la codificación de la información en términos de bits. Por ejemplo, se puede asignar el valor de 1 a la polarización orientada en la dirección positiva del eje z y el valor 0 a la polarización orientada en la dirección negativa del eje z (Figura 32). Con esta convención, un arreglo de ocho núcleos, cada uno con polaridad definida, constituirá un byte de información almacenada. De acuerdo con la literatura, los dominios magnéticos pueden desplazarse velocidades de hasta 1000 m/s [9,36]. Si consideramos que el tamaño de un dominio magnético en las cadenas TMV es de aproximadamente 75 nm, la frecuencia con la que un dominio pasa por un punto fijo será de 13.3 GHz. Además, la capacidad de transporte de información en términos de bytes será de 1666 MB/s. Es importante destacar que esta velocidad es exclusivamente para un único nanohilo. Si un dispositivo se diseñase con múltiples nanohilos en paralelo, la velocidad de transferencia de información aumentaría de manera proporcional al número de nanohilos empleados. Esto ofrece la probabilidad de crear dispositivos de almacenamiento de alta capacidad. Por otro lado, el movimiento de los dominios magnéticos ocurre de manera interna dentro del nanohilo, lo que elimina la necesidad de componentes mecánicos y, por tanto, contribuyendo con la durabilidad del dispositivo.

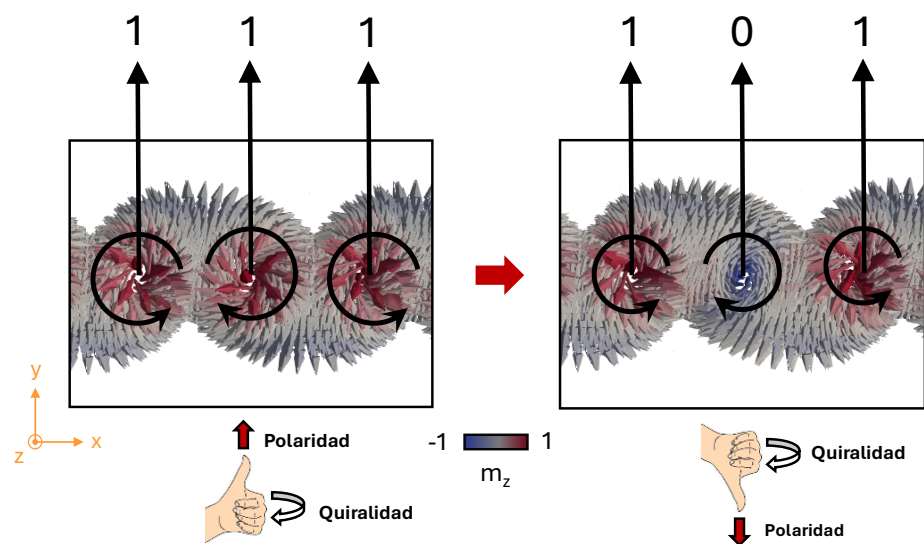


Figura 32. Nomenclatura para la dirección de la polaridad de cada núcleo.

5 Conclusiones

En este trabajo de simulaciones micromagnéticas se ha logrado evaluar en qué condiciones se pueden formar cadenas de TMV sobre un nanohilo magnético de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, el cual posee anisotropía transversal. Como parámetros de estudio se evaluó la dirección de saturación, la temperatura (0 K y 300 K) y el diámetro del nanohilo. Al emplear el software *mumax*³, encontramos que la realización de simulaciones dinámicas, combinadas con un proceso de minimización de la energía en el estado final (criterio P), permitieron obtener resultados similares a los que se obtendrían realizando simulaciones estáticas mediante OOMMF, software de referencia. El uso de este método no sólo permite que *mumax*³ logré simular estados remanentes experimentalmente posibles (algo que no era posible si se realizan simulaciones estáticas), sino que además nos permite aprovechar al máximo la capacidad del cálculo paralelizado que nos ofrece la GPU.

Al realizar simulaciones micromagnéticas usando diferentes direcciones de saturación se encuentra que la cadena de TMV no sólo se forma al aplicar un campo de saturación perpendicular al plano del eje de fácil magnetización, sino que también es posible inclinar el campo externo hasta 2.56° (barrido longitudinal) y 4.7° (barrido transversal). Si tenemos en cuenta que los TMV pueden ser usados como bits de información, los ángulos antes mencionados pueden ser tomados para estimar la tolerancia experimental con la cual se puede desviar el campo de saturación, sin afectar la formación plena de las cadenas de TMV a lo largo de nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$. Por otro lado, si saturamos a ángulos superiores, la magnetización del nanohilo alcanza estados remanentes que pueden combinar la formación de estados TMV y LMV, o consolidar un estado LMV/CDW/LMV, cuya configuración micromagnética es energéticamente más favorable que los anteriormente mencionados.

De acuerdo con la evolución de las energías micromagnéticas, cuando se pasa de saturación a remanencia, tanto para la formación de la cadena de TMV como para el estado LMV/CDW/LMV, el estado remanente se alcanza minimizando las energías magnetostáticas y de anisotropía magnetocristalina, mientras que la energía de intercambio se incrementa. Esto demuestra que el proceso de minimización de la energía es muy similar para ambos casos, lo que no nos permite identificar mecanismos para la formación de una u otra nanoestructura. Sin embargo, si hacemos un análisis de la evolución de la magnetización, encontramos como la dirección de saturación es quien controla el estado remanente del sistema. En este contexto, se identificó que la orientación del campo magnético aplicado es la variable de control fundamental para discriminar entre las formaciones LMV y TMV.

Por otro lado, las simulaciones realizadas a temperatura ambiente indicaron que, para ángulos mayores a $\pm 2^\circ$, se pueden observar múltiples disposiciones LMV, en contraste con

lo ocurrido a cero absoluto. Además, se verificó la posibilidad de invertir individualmente la polarización de los núcleos en las cadenas TMV mediante la aplicación de campos localizados de 178 mT, lo que abre nuevas perspectivas en dispositivos de almacenamiento magnético. Finalmente, se constató que al aumentar el diámetro del nanohilo, el número de núcleos en las cadenas TMV tiende a reducirse y las distancias entre ellos a incrementarse, aunque esta tendencia no se comporta de forma lineal. Se evidencia asimismo que los núcleos TMV presentan una extensión transversal menor que la longitudinal, ya que en esta dirección presentan cierta “libertad” para distribuirse en el nanohilo.

6 Perspectivas

Se plantean las siguientes líneas de investigación para profundizar en el entendimiento y aplicaciones de las cadenas de vórtices magnéticos tipo TMV:

1. Se propone el modelamiento de materiales con constante de anisotropía uniaxial mayores a 350 kJ/m^3 . Esto permite explorar el impacto de diferentes valores de anisotropía magnetocristalina en la estabilidad de las cadenas TMV.
2. Se propone la resolución analítica o aproximada de las ecuaciones de Brown para la microestructura remanente TMV del nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$, con el objetivo de determinar parámetros clave en la formación de esta estructura, así como el campo crítico para la nucleación de la polarización en los núcleos TMV.
3. Determinación de las densidades de carga magnética volumétrica y superficial en el nanohilo de $\text{Co}_{85}\text{Ni}_{15}$ para las disposiciones LMV y TMV.
4. Se propone el desarrollo de un esquema conceptual para un dispositivo capaz de realizar la manipulación localizada y lectura de la polarización en núcleos TMV. Esto permitiría explorar el uso de cadenas TMV como dispositivos de almacenamiento de información de alta velocidad.
5. Se propone investigar el efecto de corrientes de espín polarizada aplicadas a cadenas TMV. Estas simulaciones buscarían evaluar la posibilidad de desplazar los vórtices a lo largo del nanohilo, lo que podría facilitar el diseño de dispositivos como memorias de tipo racetrack basadas en TMV.
6. Se propone investigar los campos de fuga generados por las cadenas TMV en el entorno cercano del nanohilo. Este estudio tiene como objetivo evaluar la factibilidad de emplear dichos campos en procesos de lectura de información asociada a la polarización de los vórtices magnéticos.
7. Se propone investigar la respuesta de las cadenas TMV en geometrías de nanohilos con curvatura tipo U, lo que podría tener implicaciones en el diseño de circuitos magnéticos y dispositivos de almacenamiento magnético.
8. Se propone investigar el ciclo de histéresis del material para comprender mejor su respuesta magnética ante la aplicación de campos externos.
9. Se propone estudiar la posibilidad o imposibilidad de la inversión de quiralidad de los núcleos de las cadenas TMV.

Anexos

Formación de vórtices TMV

```
Ux := 320
Uy := 28
Uz := 28
SetGridsize(Ux, Uy, Uz)

Wx := 320
Wy := 14
Wz := 14
d := 5e-9
SetCellsize(d, d, d)

MaxErr = 1e-7
geometryShape := cylinder(d*Wy, d*Wx).roty(pi/2)
setGeom(geometryShape)
defregion(1, xrange(-120*d, 120*d).intersect(geometryShape))
defregion(2, xrange(-120*d, 120*d).inverse().intersect(geometryShape))

Temp = 0
alpha.setRegion(1, 1)
alpha.setRegion(2, 1)

Msat.setRegion(1, 1273e3)
Aex.setRegion(1, 26e-12)
Kul.setRegion(1, 350e3)
Lambda.setRegion(1, 0)
Pol.setRegion(1, 0)

Msat.setRegion(2, 1273e3)
Aex.setRegion(2, 26e-12)
Kcl.setRegion(2, 100e3)
Lambda.setRegion(2, 0)
Pol.setRegion(2, 0)

angle1 := 78
anisU.setRegion(1, vector(cos(angle1*pi/180), sin(angle1*pi/180), 0) )

angle2 := 81
anisC1.setRegion(2, vector(cos(angle2*pi/180), sin(angle2*pi/180), 0) )
anisC2.setRegion(2, vector(cos((angle2+90)*pi/180), sin((angle2+90)*pi/180), 0) )

m = randomMag()
angle3 := 0.0

for i:=0; i<1000; i++ {
    Zeeman_P := abs(E_Zeeman.get()) * 100 / ( abs(E_anis.get()) +
abs(E_demag.get()) + abs(E_Zeeman.get()) + abs(E_exch.get()) +
abs(E_therm.get()) )
    if Zeeman_P > 0.1 || i == 0 {
        Bext := 2 / (1 + exp( (0.025 * i) - 5 ) )
        B_ext = vector(0, Bext*sin(angle3*pi/180), Bext*cos(angle3*pi/180))
        run(25e-12)
    } else {
```

```

        B_ext = vector(0, 0, 0)
        Minimize()
    }
}

saveas(m, "mAngle0-0grad")
Exit()

```

Barrido de dirección de campo magnetico externo

```

import os
import numpy as np

plane = ['xz', 'yz', 'xy']
angle_min = -8
angle_max = 8
number_angle_simulations = 200
dir = r".\Simulaciones"

Temp = 0

mumax_file_name = 'FCC-HCP-FCC_plane' + plane[1] + '-' + str(Temp) + 'K'

#-----

for angle in np.linspace(angle_min, angle_max,
number_angle_simulations).round(2):

    mumax_file = open(os.path.join(dir, mumax_file_name + ".mx3"), 'w+')

    # dimensiones del universo
    mumax_file.write('Ux := 320\n')
    mumax_file.write('Uy := 28\n')
    mumax_file.write('Uz := 28\n')
    mumax_file.write('SetGridsize(Ux, Uy, Uz)\n\n')

    # dimenciones del nanohilo: diametro 70 nm - largo 1600 nm
    mumax_file.write('Wx := 320\n')
    mumax_file.write('Wy := 14\n')
    mumax_file.write('Wz := 14\n')
    mumax_file.write('d := 5e-9\n')
    mumax_file.write('SetCellsize(d, d, d)\n\n')

    # se establece la geometria del nanohilo
    mumax_file.write('MaxErr = 1e-7\n')
    mumax_file.write('geometryShape := cylinder(d*Wy, d*Wx).roty(pi/2)\n')
    mumax_file.write('setGeom(geometryShape)\n')
    mumax_file.write('defregion(1, xrange(-120*d,
120*d).intersect(geometryShape))\n')
    mumax_file.write('defregion(2, xrange(-120*d,
120*d).inverse().intersect(geometryShape))\n\n')

    mumax_file.write('Temp.setRegion(1, ' + str(Temp) + ')\n')
    mumax_file.write('Temp.setRegion(2, ' + str(Temp) + ')\n')
    mumax_file.write('alpha.setRegion(1, 1)\n')
    mumax_file.write('alpha.setRegion(2, 1)\n\n')

```

```

# hcp
mumax_file.write('Msat.setRegion(1, 1273e3)\n')
mumax_file.write('Aex.setRegion(1, 26e-12)\n')
mumax_file.write('Kul.setRegion(1, 350e3)\n')
mumax_file.write('Lambda.setRegion(1, 0)\n')
mumax_file.write('Pol.setRegion(1, 0)\n\n')

# fcc
mumax_file.write('Msat.setRegion(2, 1273e3)\n')
mumax_file.write('Aex.setRegion(2, 26e-12)\n')
mumax_file.write('Kcl.setRegion(2, 100e3)\n')
mumax_file.write('Lambda.setRegion(2, 0)\n')
mumax_file.write('Pol.setRegion(2, 0)\n\n')

# angulo medido desde el eje del nanohilo
# hcp
mumax_file.write('angle1 := 78\n')
mumax_file.write('anisU.setRegion(1, vector(cos(angle1*pi/180),
sin(angle1*pi/180), 0) )\n\n')

# fcc
mumax_file.write('angle2 := 81\n')
# primer eje de anisotropia cubica
mumax_file.write('anisC1.setRegion(2, vector(cos(angle2*pi/180),
sin(angle2*pi/180), 0) )\n')
# segundo eje de anisotropia cubica
mumax_file.write('anisC2.setRegion(2, vector(cos((angle2+90)*pi/180),
sin((angle2+90)*pi/180), 0) )\n\n')

# guardar datos
mumax_file.write('angle3 := 0.0\n')
mumax_file.write('TableAddVar(angle3, "Angulo", "grad")\n')
mumax_file.write('tableAdd(Edens_anis)\n')
mumax_file.write('tableAdd(Edens_demag)\n')
mumax_file.write('tableAdd(Edens_exch)\n')
mumax_file.write('tableAdd(Edens_total)\n\n')
mumax_file.write('tableAdd(E_anis)\n')
mumax_file.write('tableAdd(E_demag)\n')
mumax_file.write('tableAdd(E_exch)\n')
mumax_file.write('tableAdd(E_total)\n\n')

# configuración inicial de magnetizacion
mumax_file.write('m = randomMag()\n')
mumax_file.write('angle3 = ' + str(angle) + '\n\n')

mumax_file.write('for i:=0; i<1000; i++ {\n')
mumax_file.write('    Zeeman_P := abs(E_Zeeman.get()) * 100 / (
abs(E_anis.get()) + abs(E_demag.get()) + abs(E_Zeeman.get()) +
abs(E_exch.get()) + abs(E_therm.get()) )\n')
mumax_file.write('    if Zeeman_P > 0.1 || i == 0 {\n')
mumax_file.write('        Bext := 2 / (1 + exp( (0.025 * i) - 5 ) )\n')

    if( 'xz' in mumax_file_name ):
        mumax_file.write('        B_ext = vector(Bext*sin(angle3*pi/180), 0,
Bext*cos(angle3*pi/180))\n')
    if( 'yz' in mumax_file_name ):

```

```

        mumax_file.write('          B_ext = vector(0, Bext*sin(angle3*pi/180),
Bext*cos(angle3*pi/180))\n')
        if( 'xy' in mumax_file_name ):
            mumax_file.write('          B_ext = vector(Bext*sin(angle3*pi/180),
Bext*cos(angle3*pi/180), 0)\n')

        mumax_file.write('          run(25e-12)\n')
        mumax_file.write('      } else {\n')
        mumax_file.write('          B_ext = vector(0, 0, 0)\n')
        mumax_file.write('          Minimize()\n')
        mumax_file.write('      }\n')
        mumax_file.write('}\n\n')
        mumax_file.write('saveas(m, "mAngle" + str(angle).replace('.', '-') +
'grad')\n')
        mumax_file.write('tablesave()\n')
        mumax_file.write('Exit()')

    mumax_file.close()

    if angle == angle_min:
        os.system('mumax3 -i ' + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".mx3"))
        os.remove( os.path.join(dir, mumax_file_name + ".mx3") )
        with open(os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "table.txt"),
'r') as table:
            with open(os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "aux.txt"),
'w') as aux:
                lines = [line for line in table]
                aux.write(lines[0])
                table.close()
                aux.close()

    else:
        os.system('mumax3 ' + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".mx3"))
        os.remove( os.path.join(dir, mumax_file_name + ".mx3") )

        with open(os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "table.txt"), 'r')
as table:
            with open(os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "aux.txt"), 'a')
as aux:
                lines = [line for line in table]
                aux.write(lines[-1])
                table.close()
                aux.close()

os.system("mumax3-convert -vtk=binary " + os.path.join(dir, mumax_file_name +
".out", "*.ovf"))

if not os.path.exists( os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "VTS") ):
    os.system("mkdir " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "VTS"))
else:
    os.system("del " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "VTS",
"*.vts"))

if not os.path.exists( os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "img") ):
    os.system("mkdir " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "img"))

if not os.path.exists( os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "OVF") ):
    os.system( "mkdir " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "OVF") )

```

```

else:
    os.system("del " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "OVF",
    "*.ovf"))

os.system("move " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "*.vts") + " "
+ os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "VTS"))

os.system("move " + os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "*.ovf") + " "
+ os.path.join(dir, mumax_file_name + ".out", "OVF"))

```

Inversión localizada de polaridad

```

Ux := 320
Uy := 28
Uz := 28
SetGridsize(Ux, Uy, Uz)

Wx := 320
Wy := 14
Wz := 14
d := 5e-9
SetCellsize(d, d, d)

MaxErr = 1e-7
geometryShape := cylinder(d*Wy, d*Wx).roty(pi/2)
setGeom(geometryShape)
defregion(1, xrange(-120*d, 120*d).intersect(geometryShape))
defregion(2, xrange(-120*d, 120*d).inverse().intersect(geometryShape))
defregion(3, xrange(30*d, 50*d).intersect(geometryShape))

Temp.setRegion(1, 0)
Temp.setRegion(2, 0)
Temp.setRegion(3, 0)
alpha.setRegion(1, 1)
alpha.setRegion(2, 1)
alpha.setRegion(3, 1)

Msat.setRegion(1, 1273e3)
Aex.setRegion(1, 26e-12)
Kul.setRegion(1, 350e3)
Lambda.setRegion(1, 0)
Pol.setRegion(1, 0)

Msat.setRegion(3, 1273e3)
Aex.setRegion(3, 26e-12)
Kul.setRegion(3, 350e3)
Lambda.setRegion(3, 0)
Pol.setRegion(3, 0)

Msat.setRegion(2, 1273e3)
Aex.setRegion(2, 26e-12)
Kcl.setRegion(2, 100e3)
Lambda.setRegion(2, 0)
Pol.setRegion(2, 0)

angle1 := 78
anisU.setRegion(1, vector(cos(angle1*pi/180), sin(angle1*pi/180), 0) )

```

```

anisU.setRegion(3, vector(cos(angle1*pi/180), sin(angle1*pi/180), 0) )

angle2 := 81
anisC1.setRegion(2, vector(cos(angle2*pi/180), sin(angle2*pi/180), 0) )
anisC2.setRegion(2, vector(cos((angle2+90)*pi/180), sin((angle2+90)*pi/180),
0) )
m.LoadFile("m000001.ovf")
Bext := 0.178
B_ext.setRegion(3, vector( 0, 0, - Bext) )
run(3e-9)

B_ext.setRegion(3, vector(0, 0, 0) )
run(3e-9)
Minimize()

save(m)
Exit()

```

Referencias

- [1] M. I. Irshad, F. Ahmad, and N. Mohammed, A Review on Nanowires as an Alternative High Density Magnetic Storage Media, *AIP Conf. Proc.* **1482**, 625 (2012).
- [2] A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, and B. Hillebrands, Review on spintronics: Principles and device applications, *J. Magn. Magn. Mater.* **509**, 166711 (2020).
- [3] S. Bhatti, R. Sbiaa, A. Hirohata, H. Ohno, S. Fukami, and S. N. Piramanayagam, Spintronics based random access memory: a review, *Mater. Today* **20**, 530 (2017).
- [4] A. Mukhtar, K. Wu, X. Cao, and L. Gu, Magnetic nanowires in biomedical applications, *Nanotechnology* **31**, 433001 (2020).
- [5] *Nanomagnetism: Fundamentals and Applications* (2014).
- [6] I. M. Andersen et al., Field tunable three-dimensional magnetic nanotextures in cobalt-nickel nanowires, *Phys. Rev. Res.* **3**, 033085 (2021).
- [7] S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory, *Science* **320**, 190 (2008).
- [8] J. Jaworowicz, N. Vernier, J. Ferré, A. Maziewski, D. Stanescu, D. Ravelosona, A. S. Jacqueline, C. Chappert, B. Rodmacq, and B. Diény, Magnetic logic using nanowires with perpendicular anisotropy, *Nanotechnology* **20**, 215401 (2009).
- [9] R. Hertel, Ultrafast domain wall dynamics in magnetic nanotubes and nanowires, *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 483002 (2016).
- [10] I. M. Andersen, L. A. Rodríguez, C. Bran, C. Marcelot, S. Joulie, T. Hungria, M. Vazquez, C. Gatel, and E. Snoeck, Exotic Transverse-Vortex Magnetic Configurations in CoNi Nanowires, *ACS Nano* **14**, 1399 (2020).
- [11] *Micromagnetics*, <http://micromagnetics.org/>.
- [12] H. Kronmüller and M. Fähnle, *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids* (Cambridge University Press, 2003).
- [13] P. Weiss, L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique, *J Phys Theor Appl* **6**, 661 (1907).
- [14] R. R. Birss, *Symmetry and Magnetism* (North-Holland Publishing Company, 1966).
- [15] L. Exl, D. Suess, and T. Schrefl, *Micromagnetism*, in *Handbook of Magnetism and Magnetic Materials*, edited by J. M. D. Coey and S. S. P. Parkin (Springer International Publishing, Cham, 2021), pp. 347–390.
- [16] I. Cimrák, On the Landau-Lifshitz Equation of Ferromagnetism, Ghent University, 2005.
- [17] L. Landau and E. Lifshitz, *On the Theory of the Dispersion of Magnetic Permeability in Ferromagnetic Bodies*, in *Perspectives in Theoretical Physics*, edited by L. P. Pitaevski (Pergamon, Amsterdam, 1992), pp. 51–65.
- [18] T. L. Gilbert, A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials, *IEEE Trans. Magn.* **40**, 3443 (2004).
- [19] W. F. Brown, Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle, *Phys. Rev.* **130**, 1677 (1963).

- [20] J. Leliaert, J. Mulkers, J. De Clercq, A. Coene, M. Dvornik, and B. Van Waeyenberge, Adaptively time stepping the stochastic Landau-Lifshitz-Gilbert equation at nonzero temperature: Implementation and validation in MuMax3, *AIP Adv.* **7**, 125010 (2017).
- [21] J. Fidler and T. Schrefl, Micromagnetic modelling - the current state of the art, *J. Phys. Appl. Phys.* **33**, R135 (2000).
- [22] V. Kamberský, On ferromagnetic resonance damping in metals, *Czechoslov. J. Phys. B* **26**, 1366 (1976).
- [23] R. Kikuchi, On the Minimum of Magnetization Reversal Time, *J. Appl. Phys.* **27**, 1352 (1956).
- [24] A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helsen, F. Garcia-Sanchez, and B. Van Waeyenberge, The design and verification of MuMax3, *AIP Adv.* **4**, 107133 (2014).
- [25] J. E. Miltat and M. J. Donahue, *Numerical Micromagnetics: Finite Difference Methods*, in *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials* (John Wiley & Sons, Ltd, 2007).
- [26] *Mumax2 - Grupos de Google*, <https://groups.google.com/g/mumax2>.
- [27] *Mumax3*, <https://mumax.github.io/>.
- [28] M. J. Donahue and D. G. Porter, OOMMF User's Guide, Version 1.0, No. NIST IR 6376, National Institute of Standards and Technology, 1999.
- [29] J. A. Fernandez-Roldan, Yu. P. Ivanov, and O. Chubykalo-Fesenko, 14 - *Micromagnetic Modeling of Magnetic Domain Walls and Domains in Cylindrical Nanowires*, in *Magnetic Nano- and Microwires (Second Edition)*, edited by M. Vázquez (Woodhead Publishing, 2020), pp. 403–426.
- [30] M. J. Donahue, D. G. Porter, R. D. McMichael, and J. Eicke, Behavior of μ MAG standard problem No. 2 in the small particle limit, *J. Appl. Phys.* **87**, 5520 (2000).
- [31] W. Rave, K. Ramstöck, and A. Hubert, Corners and nucleation in micromagnetics, *J. Magn. Magn. Mater.* **183**, 329 (1998).
- [32] A. Carl, D. Weller, R. Savoy, and B. Hillebrands, HCP-FCC Phase Transition in Co–Ni Alloys Studied With Magneto-Optical Kerr Spectroscopy, *MRS Online Proc. Libr.* **343**, 351 (1994).
- [33] A. S. Samardak et al., Variation of magnetic anisotropy and temperature-dependent FORC probing of compositionally tuned Co-Ni alloy nanowires, *J. Alloys Compd.* **732**, 683 (2018).
- [34] L. A. Rodríguez, C. Bran, D. Reyes, E. Berganza, M. Vázquez, C. Gatel, E. Snoeck, and A. Asenjo, Quantitative Nanoscale Magnetic Study of Isolated Diameter-Modulated FeCoCu Nanowires, *ACS Nano* **10**, 9669 (2016).
- [35] D. Wolf et al., 3D Magnetic Induction Maps of Nanoscale Materials Revealed by Electron Holographic Tomography, *Chem. Mater.* **27**, 6771 (2015).
- [36] C. Bran et al., Domain wall propagation and pinning induced by current pulses in cylindrical modulated nanowires, *Nanoscale* **15**, 8387 (2023).