FACULTAD DE CIENCIAS GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

## ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA DINÁMICA DE PAREDES ENTRE DOMINIOS MAGNÉTICOS: APLICACIÓN A STACKS ASIMÉTRICOS



## Universidad de Valladolid

AUTOR: Pablo Enrique Guillem Fernández

> TUTOR: Óscar Alejos Ducal

## Índice general

1.	Intr	roducción	1			
2.	Fun	ndamentos teóricos	3			
	2.1.	Micromagnetismo	3			
	2.2.	Soluciones estáticas: Ecuación de Brown	5			
	2.3.	Dinámica del sistema: Ecuación de LLG	10			
	2.4.	Contribuciones a la energía libre	13			
		2.4.1. Energía de intercambio	13			
		2.4.2. Términos magnetostáticos	16			
		2.4.3. Energía de anisotropía	18			
		2.4.4. Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya	19			
3.	Esti	ructura bajo estudio: <i>Stacks</i> asimétricos	23			
	3.1.	Acoplamiento espín-órbita	23			
	3.2.	Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya	24			
	3.3.	Anisotropía magnética perpendicular	25			
	3.4.	Parámetros de nuestro estudio	25			
4.	Software 27					
	4.1.	MuMax3	27			
	4.2.	Método de las diferencias finitas	29			
		4.2.1. Campo efectivo	29			
		4.2.2. Integración numérica: RK4	32			
5.	Resultados 35					
	5.1.	Efectos numéricos	35			
		5.1.1. Efecto del tamaño de celda	36			
		5.1.2. Efecto <i>staircase</i>	38			
		5.1.3. Cálculo de la velocidad	41			
	5.2.	Resultados físicos	42			
		5.2.1. Dependencia con la anchura de la cinta	42			
		5.2.2. Dependencia con el tipo de pared	43			
		5.2.3. Dependencia con la curvatura	46			
		5.2.3.Dependencia con la curvatura5.2.4.Deformación de la pared	$\frac{46}{47}$			

#### 6. Estudios futuros

7.	Aplicaciones	61
8.	Conclusiones	63

## Agradecimientos

Este Trabajo de Fin de Grado marca el final de una etapa, tras cuatro años de carrera. Han sido años en los que ha habido muchas emociones y obstáculos y no habría llegado hasta este punto sin el apoyo de todas las personas que me acompañaron en esta etapa.

En especial quiero agradecer a mi familia, a mis amigos y muy particularmente a Carlota por el apoyo que me han dado en los momentos más difíciles, haciéndolos más llevaderos. Sin vosotros no habría llegado donde ahora estoy.

También agradecer a los profesores que me formaron y muy particularmente a mi tutor, Óscar Alejos, y a Luis Sánchez-Tejerina la ayuda que me brindaron para la realización de este trabajo. Gracias por la paciencia, por la disponibilidad, por los consejos y por la guía que habéis sido para mí. Sin vosotros este trabajo no habría sido posible.

Y por último, agradecer en general a todos mis compañeros y todos aquellos que me tendieron una mano de ayuda en estos cuatro años. A todos vosotros también, gracias.

## Lista de Abreviaturas

BDW	Bloch Domain Wall
CCW	Counterclockwise
CPU	Central Processing Unit
CW	Clockwise
DMI	Dzyaloshinskii-Moriya Interaction
DU	Down-Up
DW	Domain Wall
$\mathbf{FL}$	Field-Like
$\mathbf{FM}$	Ferromagnetic
GPU	Graphics Processing Unit
HM	Heavy Metal
iDMI	interfacial Dzyaloshinskii-Moriya Interaction
LLG	Landau-Lifshitz-Gilbert
NDW	Néel Domain Wall
Ox	Oxide
PMA	Perpendicular Magnetic Anisotropy
RK4	Runge-Kutta de orden 4
UD	Up-Down
SHE	Spin Hall Effect
$\mathbf{SL}$	Slonczewski-Like
SOC	Spin-Orbit Coupling
SOT	Spin-Orbit Torque
STT	Spin Transfer Torque

## Resumen

Se estudia en este trabajo la dinámica de las paredes de dominio en sistemas que combinan alta anisotropía magnética perpendicular y fuerte acoplamiento espín-órbita desde un punto de vista fenomenológico apoyado en simulaciones por ordenador. El comportamiento de estas paredes de dominio no está perfectamente claro todavía, debido a la gran complejidad de estos sistemas. Dos motivos impulsan la investigación en este área de estudio. El primero y más fundamental es el conocimiento de los mecanismos subyacentes responsables de la dinámica. El segundo, más aplicado, es el potencial de estos sistemas como material de construcción para futuras memorias magnéticas de alto rendimiento.

## Abstract

In this work we study the dynamics of domain-walls in systems that combine high perpendicular magnetic anistropy and strong spin-orbit coupling from a fenomenologic point of view supported on computer simulations. The behaviour of this domain-walls is still not perfectly clear, due to the great complexity of these systems. Two reasons drive the research in this area of study. The first one and more fundamental is the knowledge of the underlying mechanisms responsible of the dynamics. The second one, more applied, is the potential of these systems as the basis for future high performance magnetic memories.

## Capítulo 1

## Introducción

Vamos a realizar nuestro estudio en el marco del micromagnetismo. Esta teoría se sitúa en la escala mesoscópica, a medio camino entre la escala microscópica y la macroscópica. Precisamente por encontrarse a medio camino entre ambas escalas no podemos realizar el estudio *ab initio*, porque el cálculo resulta extremadamente complejo dado el gran número de individualidades a considerar, pero tampoco es posible enfocar el problema desde las teorías macroscópicas, en particular la de dominios, ya que los fenómenos que queremos estudiar suceden a una escala menor que estos dominios. Podríamos decir que la teoría micromagnética es de alguna forma más esencial que la teoría de dominios. En la teoría micromagnética los dominios y el resto de estructuras magnéticas aparecen de forma natural partiendo únicamente de hipótesis más fundamentales sobre la magnetización del sistema. Estos son conceptos fundamentales en la teoría de dominios, asumidos *a priori*.

Nuestro objetivo va a ser en última instancia estudiar la dinámica de las paredes de dominio que separan los dominios magnéticos que aparecen en un material ferromagnético. Estos dominios son regiones más o menos extensas del material en los que la magnetización es aproximadamente constante. Aparecen como resultado del balance entre las diferentes contribuciones energéticas. Las paredes de dominio son entonces regiones de transición entre dominios que tienen diferente magnetización.

Este estudio resulta todavía demasiado complicado como para obtener una solución analítica, salvo en casos sencillos tras realizar una serie de aproximaciones, lo que da lugar al llamado modelo unidimensional (1D). En el modelo 1D, la pared está caracterizada como una partícula sobre la que actúan unas fuerzas. Aún así, el enfoque de este trabajo evita este problema. Una vez obtenida una expresión para la dinámica de la magnetización, la resolveremos de forma numérica para diferentes sistemas.

En nuestro caso particular, estos sistemas serán *stacks* asimétricos. Estructuras multicapa en las que existe una gran asimetría de inversión, lo que va a dar lugar a fenómenos interesantes que estudiaremos más adelante.

## Capítulo 2

### Fundamentos teóricos

#### 2.1. Micromagnetismo

Los materiales magnéticos están constituidos, desde el punto de vista del magnetismo, esencialmente por un conjunto de dipolos magnéticos que podemos llamar dipolos elementales. Estos dipolos magnéticos se asocian con momentos angulares, tanto de espín como orbitales, de cargas eléctricas en la escala atómica. Las propiedades magnéticas que son observables a escala macroscópica son el resultado de la interacción y superposición de estos dipolos elementales que existen en la escala microscópica.

En el caso de materiales ferromagnéticos como los que se estudian en este trabajo, la llamada interacción de intercambio (directo) favorece la alineación paralela de los espines de los electrones vecinos. Estos electrones van a ser en última instancia los responsables de los dipolos elementales que mencionamos en el párrafo anterior. Tenemos entonces que, al menos en un entorno donde la interacción de intercambio sea la dominante, lo cual va a suceder a distancias suficientemente pequeñas, los espines tienen la misma orientación. Dicho de otra forma, los dipolos elementales son de forma local prácticamente paralelos<sup>[1, 2, 3]</sup>

$$\vec{\mu}_i \approx \vec{\mu}_j \qquad \text{para} \qquad |\vec{r}_i - \vec{r}_j| < \lambda$$

$$(2.1)$$

donde  $\lambda$  es la llamada longitud de intercambio, que determina la distancia hasta la que esta interacción resulta ser la dominante. Este hecho de que la interacción de intercambio es dominante a cortas distancias va a permitirnos realizar posteriormente ciertas aproximaciones que simplificarán el problema a la hora de considerar diferentes contribuciones energéticas.

Asumimos también que la densidad de dipolos elementales es prácticamente homogénea en el material. Esto unido a la anterior hipótesis nos permite aproximar nuestra distribución discreta de momentos magnéticos por un campo vectorial continuo  $\vec{M}(\vec{r})$  de forma que

$$\int_{\Omega} \vec{M}(\vec{r}) d^3 r \approx \sum_{i} \mathbf{1}_{\Omega}(\vec{r}_i) \vec{\mu}_i \tag{2.2}$$

que es válida para volúmenes  $\Omega$  del orden de  $\lambda^3$  o mayores. Este campo vectorial  $\vec{M}$  es lo que llamamos magnetización.

Ahora bien, gracias a que la densidad de momentos  $\vec{m}_i$  es homogénea y a que su módulo no cambia, podemos hacer

$$\vec{M}(\vec{r}) = M_s \,\vec{m}(\vec{r}) \tag{2.3}$$

donde  $M_s$  es la llamada magnetización de saturación y el campo vectorial  $\vec{m}(\vec{r})$  es lo que podemos llamar "magnetización normalizada". Este campo verifica en todo punto

$$|\vec{m}(\vec{r})| = 1 \tag{2.4}$$

Las hipótesis que nos han llevado a aceptar en última instancia la expresión en (2.3) para la magnetización merecen un último comentario al respecto de la temperatura. Podríamos decir que lo dicho hasta ahora es estrictamente cierto a temperatura cero (que será la que utilicemos en nuestras simulaciones). Sin embargo, es necesario conocer los límites de nuestra teoría y la temperatura va a ser uno de esos límites. Cuando la temperatura del sistema se acerque a la temperatura de Curie vamos a tener problemas en mantener las dos hipótesis con las que hemos llegado hasta aquí.

La primera, que afirma que los dipolos elementales son esencialmente paralelos a nivel local, puede verse afectada por la agitación térmica. De hecho, si se alcanza la temperatura de Curie esta hipótesis resulta completamente falsa, ya que esta temperatura es, por definición, la temperatura a la que el sistema pierde su ordenación magnética. Pero la hipótesis de la alineación de los dipolos vecinos puede verse cuestionada a temperaturas muy por debajo de la temperatura de Curie. Considerar simplemente una temperatura dependiente de la posición ya pondría en problemas esta hipótesis. Estamos aceptando que la magnetización de saturación  $M_s$  es una constante del material. Sin embargo, diferentes temperaturas en el material introducirían en esta magnetización de saturación una dependencia con la posición, igual que la que aparece en la temperatura, ya que la amplitud de las oscilaciones térmicas afectaría a la integral de volumen calculada en (2.2). Así, en aquellos puntos donde la temperatura fuese mayor, las oscilaciones serían también más importantes, y la magnetización de saturación en ese punto menor que la calculada a temperatura cero.

En cuanto a la segunda hipótesis, esta afirma que la densidad de los dipolos y su módulo son constantes. Si nos olvidamos de la dilatación térmica del material que pueda afectar a la densidad de los dipolos, podemos aceptar que esta va a ser constante, ya que en última instancia estos dipolos se asocian a nivel microscópico a los átomos del material ferromagnético, que se encuentran fijados en una red cristalina. Sin embargo, la temperatura sí puede afectar al otro punto de la hipótesis, el módulo de los dipolos. Si esta temperatura fuese suficientemente alta, los dipolos podrían poblar niveles de energía con distinto momento dipolar. A nivel cuántico es sencillo entender esto. Un cierto átomo completo, en el sentido de incluir también sus electrones, en su estado fundamental tiene un cierto momento dipolar. Si aumentamos la temperatura, permitimos a ese átomo alcanzar estados excitados de energía, que tendrán diferente función de onda, lo que se podría traducir en un diferente momento dipolar.

Así, en lo sucesivo nos limitamos a considerar el caso en que la temperatura está muy por debajo de la temperatura de Curie. De hecho, aceptamos que esta temperatura es nula, algo que introduciremos después en nuestras simulaciones. Aunque esta no es situación física aceptable, la aproximación de temperatura nula puede servir como un primer acercamiento al problema. Además, existen extensiones del modelo micromagnético que permiten tener en cuenta los efectos de la temperatura<sup>[1, 3]</sup>, por lo que no supone un gran obstáculo en la teoría.

#### 2.2. Soluciones estáticas: Ecuación de Brown

La idea de Brown es encontrar el estado de equilibrio de un sistema para una situación dada, a través de la minimización de la energía. Las ecuaciones de Brown describen este estado. Esto se hacía en teoría de dominios comparando diferentes configuraciones de dominios (cuya existencia era postulada y asumida *a priori*) para el sistema y buscando aquella que minimizase la energía. Pero este procedimiento falla en dos puntos<sup>[7, 8, 9]</sup>.

El primero es que con este procedimiento sólo es posible conocer *cotas mínimas* para la energía del sistema. Es fácil ver esto. Simplemente, resulta imposible considerar en la comparación las infinitas posibles configuraciones de dominios. Esto hace que, aunque consideremos un número arbitrariamente grande de configuraciones, pueda existir una con una energía aún menor que todas las consideradas que no se haya tenido en cuenta.

El segundo problema es el de la histéresis magnética. El estado en que se encuentre un sistema magnético puede depender fuertemente de su historia. Esto significa que, dada una determinada historia para un sistema, el estado del mismo puede no encontrarse en el mínimo absoluto de energía, sino en un mínimo local. En la figura 2.1 se representa una situación de este tipo. Tras un determinado proceso es posible que el sistema acabe en el estado indicado con un círculo blanco a la izquierda de la imagen, en un mínimo local de energía. Este no es, claramente, el mínimo absoluto de energía, pero para que el estado de mínima energía se alcance sería necesario aportar una energía  $E_B$ , de forma que no se alcanza el mínimo absoluto de forma espontánea. El sistema podría sobrepasar la barrera de energía si se le suministra esta energía  $E_B$  alcanzando, entonces sí, el estado de mínima energía.

Para obtener las ecuaciones de Brown que sean válidas en la situación más general, partimos únicamente de principios variacionales para su deducción. Las estructuras magnéticas, como ya hemos indicado, aparecen de forma natural por este procedimiento como resultado del cálculo, y no son asumidas *a priori*. Es a esta teoría a la que inicialmente Brown llamó "micromagnetismo", término que después se extendió a cualquier cálculo que ignorase la naturaleza discreta de la materia, tomando el vector magnetización como una función continua del espacio.

Así, vamos a seguir un camino equivalente, aunque diferente, al que siguió Brown en la deducción de las ecuaciones que llevan su nombre. Empezamos con el principio variacional de Hamilton que nos



Figura 2.1: Esquema de la configuración de energía en un sistema con histéresis.

asegura que la acción, I, definida como la integral del lagrangiano entre dos instantes de tiempo $t_1$ y $t_2$ 

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L \, dt \tag{2.5}$$

toma un valor estacionario para la evolución real del sistema. Recordamos también que el lagrangiano no es más que la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial del sistema

$$L = T - U \tag{2.6}$$

Podemos entonces separar, en este lagrangiano total, una contribución asociada al volumen del sistema bajo estudio y otra debida a la superficie del mismo. Y dentro de cada una de ellas también podemos distinguir una parte cinética y una parte potencial. Así tenemos

$$L = \int (l_V + l_S) = \int_V (t_V + u_V) + \int_S (t_S + u_S)$$
(2.7)

Asumimos en este punto que la parte cinética de la contribución superficial es nula<sup>[1]</sup>, por lo que no contribuye

$$t_S = 0 \tag{2.8}$$

Entonces se puede reescribir el lagrangiano como

$$L = \int_{V} l_V \, dV - \int_{S} u_S \, dS \tag{2.9}$$

Estudiamos ahora la dependencia de  $l_V$  y  $u_S$ . La primera, la densidad lagrangiana en el volumen, va a depender (en el caso más general) de la posición  $\vec{r}$ , el tiempo t y la magnetización  $\vec{m}$ , así como de sus derivadas temporales  $\dot{\vec{m}}$  y espaciales  $\vec{\nabla}\vec{m} \equiv \partial m_i/\partial r_j$ . Por otro lado, la parte potencial superficial va a depender únicamente de la magnetización  $\vec{m}$ , la posición  $\vec{r}$  y el tiempo t. Todo esto se escribe de forma matemática

$$l_V = l_V(\vec{m}, \dot{\vec{m}}, \vec{\nabla}\vec{m}, \vec{r}, t) \tag{2.10a}$$

$$u_S = u_S(\vec{m}, \vec{r}, t) \tag{2.10b}$$

Con esto, podemos reescribir el principio de Hamilton como

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L \, dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left( \int_V l_V \, dV - \int_S u_S \, dS \right) =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left( \int_V \delta l_V \, dV - \int_S \delta u_S \, dS \right) = 0$$
(2.11)

Puesto en palabras, lo que estamos diciendo es que la variación de la acción debe anularse una vez fijados  $t_1$  y  $t_2$ .

Además, imponemos la condición de que la variación de la magnetización se anule en los extremos del intervalo

$$\delta \vec{m} (\vec{r}, t_1) = \delta \vec{m} (\vec{r}, t_2) = 0$$
 (2.12)

Con la expresión

$$\delta f\left(\{u_i\}\right) = \sum_i \frac{\partial f}{\partial u_i} \,\delta u_i \,\,, \tag{2.13}$$

podemos reescribir la variación de una magnitud en términos de las variaciones de las que esta depende. En particular, aplicando esto a las densidades lagrangianas llegamos a

$$\delta l_V = \frac{\partial l_V}{\partial \vec{m}} \cdot \delta \vec{m} + \frac{\partial l_V}{\partial \left(\partial \vec{m}/\partial t\right)} \cdot \delta \left(\partial \vec{m}/\partial t\right) + \frac{\partial l_V}{\partial \left(\vec{\nabla} \vec{m}\right)} \cdot \delta \left(\vec{\nabla} \vec{m}\right)$$
(2.14a)

$$\delta u_S = \frac{\partial u_S}{\partial \vec{m}} \cdot \delta \vec{m} \tag{2.14b}$$

Si consideramos ahora las propiedades de conmutación del operador  $\delta$  con las derivadas espaciales y

temporales tenemos

$$\frac{\partial l_V}{\partial \left(\partial \vec{m}/\partial t\right)} \cdot \delta \left(\partial \vec{m}/\partial t\right) = \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial l_V}{\partial \left(\partial \vec{m}/\partial t\right)} \cdot \delta \vec{m} \right] - \frac{d}{dt} \left[ \frac{\partial l_V}{\partial \left(\partial \vec{m}/\partial t\right)} \right] \cdot \delta \vec{m}$$
(2.15a)

$$\left(\frac{\partial l_V}{\partial \left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)}\right) \cdot \delta \left(\vec{\nabla}\vec{m}\right) = \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial l_V}{\partial \left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)} \cdot \delta\vec{m}\right] - \left[\vec{\nabla} \cdot \frac{\partial l_V}{\partial \left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)}\right] \cdot \delta\vec{m}$$
(2.15b)

Podemos entonces usar el teorema de la divergencia y la igualdad (2.12) para reescribir de nuevo el principio de Hamilton de la forma

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V \left\{ \left[ \frac{\partial l_V}{\partial \vec{m}} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial l_V}{\partial (\partial \vec{m}/\partial t)} \right) - \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\partial l_V}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})} \right) \right] \cdot \delta \vec{m} \right\} - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_S \left\{ \left[ \frac{\partial u_S}{\partial \vec{m}} - \frac{\partial l_V}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})} \cdot \vec{n} \right] \cdot \delta \vec{m} \right\}$$
(2.16)

donde hemos introducido el vector  $\vec{n}$ , vector unitario normal a la superficie que envuelve al volumen apuntando hacia el exterior del mismo.

Ahora, tenemos que la variación más general posible para la magnetización compatible con la condición de normalización (2.4) se puede escribir de la forma

$$\delta \vec{m} = \vec{m} \times \delta \vec{\theta} \tag{2.17}$$

donde el vector  $\delta \vec{\theta}$  indica una pequeña rotación alrededor de un eje arbitrario. Dicho de otra forma, como estamos manteniendo el módulo de la magnetización constante, la única forma en que este vector puede variar es rotando. Esto también se puede expresar diciendo que, si consideramos el origen de coordenadas en el origen del vector  $\vec{m}$ , su extremo se encuentra siempre sobre la esfera de radio unidad centrada en el origen.

Si ahora llevamos esta condición a la expresión en (2.16) y aplicamos la identidad vectorial

$$\vec{a} \cdot \left(\vec{b} \times \vec{c}\right) = \left(\vec{a} \times \vec{b}\right) \cdot \vec{c} \tag{2.18}$$

llegamos a

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V \left\{ \left[ \frac{\partial l_V}{\partial \vec{m}} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial l_V}{\partial (\partial \vec{m}/\partial t)} \right) - \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\partial l_V}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})} \right) \right] \times \vec{m} \right\} \cdot \delta \vec{\theta} - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_S \left\{ \left[ \frac{\partial u_S}{\partial \vec{m}} - \frac{\partial l_V}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})} \cdot \vec{n} \right] \times \vec{m} \right\} \cdot \delta \vec{\theta}$$

$$(2.19)$$

Pero si recordamos que  $\delta \vec{\theta}$  es arbitrario, lo que nos está diciendo esto es que los factores que multiplican a este vector en (2.19) deben anularse. Si definimos una derivada funcional

$$\frac{\delta}{\delta \vec{m}} \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{m}} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial}{\partial \left(\vec{\nabla} \vec{m}\right)}$$
(2.20)

para hacer más compacta las expresiones, podemos escribir finalmente las ecuaciones de Euler-Lagrange del problema como

$$\vec{m} \times \left[\frac{\delta l_V}{\delta \vec{m}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial l_V}{\partial \left(\partial \vec{m}/\partial t\right)}\right)\right] = 0 \qquad \forall \ \vec{r} \in V$$
 (2.21a)

$$\vec{m} \times \left[ \frac{\partial u_S}{\partial \vec{m}} - \frac{\partial l_V}{\partial \left( \vec{\nabla} \vec{m} \right)} \cdot \vec{n} \right] = 0 \qquad \forall \vec{r} \in S$$
(2.21b)

Pero en una situación de equilibrio estático, ninguna magnitud depende del tiempo. En particular, no existe contribución cinética de ningún tipo. Esto significa que

$$t_V = 0 \tag{2.22}$$

con lo que podemos hacer

$$l_V = -u_V \tag{2.23}$$

Además tenemos que en (2.21a)

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial l_V}{\partial \left( \partial \vec{m} / \partial t \right)} \right) = 0 \tag{2.24}$$

Ahora podemos definir un vector campo efectivo usando la anterior definición de derivada funcional de la forma

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta u_V}{\delta \vec{m}} \tag{2.25}$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética del vacío, y donde hemos introducido tanto este  $\mu_0$  como  $M_s$  para dar unidades de campo magnético (en el SI) a este nuevo vector.

De forma análoga podemos hacer para un vector campo efectivo superficial

$$\vec{H}_{eff,S} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \left[ \frac{\partial u_S}{\partial \vec{m}} + \frac{\partial u_V}{\partial \left( \vec{\nabla} \vec{m} \right)} \cdot \vec{n} \right]$$
(2.26)

Entonces podemos escribir las ecuaciones de Brown en una forma compacta como

$$\vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0 \qquad \forall \ \vec{r} \in V$$
 (2.27a)

$$\vec{m} \times \vec{H}_{eff,S} = 0 \qquad \forall \vec{r} \in S$$
 (2.27b)

Lo que estas ecuaciones nos dicen es que la situación de equilibrio estático se alcanza cuando el torque  $\vec{\tau} = \mu_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}$  se anula para cada punto del sistema, algo que podíamos esperar de antemano.

A la hora de aplicar estas ecuaciones de Brown a un sistema concreto, estas resultan demasiado generales. Así, para cada caso particular, deberán estudiarse las diferentes contribuciones energéticas que son relevantes, de forma que podamos obtener una expresión más concreta para estas ecuaciones a través de la forma concreta de  $u_V$  y  $u_s$ .

#### 2.3. Dinámica del sistema: Ecuación de LLG

Hasta ahora hemos conseguido, con la obtención de las ecuaciones de Brown, información de los estados de equilibrio del sistema. Pero nuestro interés va a estar en la dinámica del mismo. Así, debemos obtener una ecuación o varias que describan el comportamiento dinámico del mismo. Podemos empezar con el torque producido sobre un momento magnético  $\vec{\mu}$  por un campo externo  $\vec{H}$  que es, en cada punto

$$\vec{\tau} = \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H} \tag{2.28}$$

Además sabemos que este torque debe ser igual a la variación temporal de momento angular total asociado al momento magnético  $\vec{\mu}$  en ese punto

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\tau} = \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H} \tag{2.29}$$

Y de la cuántica también sabemos que existe una relación entre el momento magnético de un electrón  $\vec{\mu}$  y su momento angular total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ 

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e}g\vec{J} \tag{2.30}$$

donde *e* es la carga del electrón con signo (es decir, e < 0),  $m_e$  su masa y *g* es el factor de Landé del electrón, que muy aproximadamente es  $g \approx 2$ . Si nos quedamos además con la aproximación  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \approx \vec{S}$ , válida en la mayoría de materiales ferromagnéticos, que suelen tener una contribución orbital pequeña al momento angular total<sup>[26]</sup>; e introducimos la constante giromagnética  $\gamma$  que agrupe las constantes que aparecen

$$\gamma = \frac{|e|g}{2m_e} \tag{2.31}$$

la ecuación (2.29) queda

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{\mu}\times\vec{H} \tag{2.32}$$

Agrupando un poco más con  $\gamma_0 = \gamma \mu_0$ , aceptando que debemos sustituir el campo externo  $\vec{H}$  por un campo efectivo  $\vec{H}_{eff}$  y usando que la magnetización  $\vec{M}$  es la densidad volúmica de momentos magnéticos  $\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}}{dV}$  llegamos a

$$\frac{d\dot{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \tag{2.33}$$

Esta ecuación que acabamos de obtener describe la precesión de la magnetización  $\vec{M}$  alrededor del campo  $\vec{H}_{eff}$ . Sin embargo, sabemos que esto no es lo que sucede realmente. En una situación real se termina alcanzando un estado de equilibrio. Para dar cuenta de esto, introducimos de forma puramente fenomenológica (no vamos a estudiar su origen) un término disipativo que atenúe la precesión descrita en la ecuación (2.33). Este término disipativo debe mantener la condición de normalización de la magnetización que hemos escrito en (2.4), que nos dice esencialmente que cualquier cambio en la magnetización debe ser ortogonal a la misma, como se puede ver matemáticamente viendo que esta condición implica

$$\frac{\partial \vec{m}^2}{\partial t} = 2\left(\vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial t}\right) = 0 \tag{2.34}$$

Podemos introducir este término disipativo en la ecuación de movimiento (2.33) añadiendo al campo efectivo un término de la forma

$$-\frac{\alpha}{\gamma_0}\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \tag{2.35}$$

donde hemos introducido la constante de amortiguamiento adimensional  $\alpha$ .

Si llevamos esto a la ecuación (2.33) que ya teníamos lo que obtenemos es

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma_0 \vec{M} \times \left( \vec{H}_{eff} - \frac{\alpha}{\gamma_0} \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \right) = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \left( \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right)$$
(2.36)

que es la llamada ecuación de Gilbert.

Otra forma de incluir este término disipativo es la que emplearon Landau y Lifshitz en su paper de 1935, añadiendo una contribución perpendicular tanto a la magnetización  $\vec{M}$  como al término de precesión  $\vec{M} \times \vec{H}_{eff}$ 

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma_{LL} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\alpha_{LL}}{M_s} \vec{M} \times \left( \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \right)$$
(2.37)

que es la ecuación de Landau-Lifshitz.

Conviene destacar que, aunque muy similares, la ecuación de Gilbert (2.36) y la ecuación de Landau-Lifshitz (2.37) no son completamente equivalentes. En la ecuación de Gilbert los términos de precesión de la magnetización y de alineación de la misma con el campo están acoplados, algo que no sucede en la ecuación de Landau-Lifshitz. Sin embargo, ambas ecuaciones describen realmente lo mismo, por lo que deben poderse relacionar entre sí. En particular, las constantes que aparecen en la ecuación de Landau-Lifshitz deben poder expresarse en términos de las que aparecen en la ecuación de Gilbert. Una vez combinadas ambas ecuaciones en este sentido, la ecuación resultante es la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\frac{\gamma_0}{1+\alpha^2} \vec{m} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1+\alpha^2} \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}\right)$$
(2.38)

Esta ecuación de LLG es la que después resolveremos de forma numérica a la hora de hacer las simulaciones de nuestro sistema.

A veces resulta conveniente escribir la ecuación de LLG en términos de constantes adimensionales, algo que podemos conseguir dividiendo la expresión (2.38) por  $\gamma_0 M_s$ . Así obtenemos

$$(1 + \alpha^2)\frac{\partial \vec{m}}{\partial \tau} = -\vec{m} \times \vec{h}_{eff} - \alpha \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{h}_{eff}\right)$$
(2.39)

donde  $\tau = \gamma_0 M_s t$  y  $\vec{h}_{eff} = \vec{H}_{eff}/M_s$ .

Para acabar, mostramos de forma gráfica en la figura 2.2 la situación global descrita por la ecuación de LLG.



Figura 2.2: Ilustración de la dinámica de la magnetización según la ecuación de LLG.

Lo que aparece representado es la evolución temporal de un único momento magnético  $\vec{m}$  (lo que nosotros hemos llamado  $\vec{\mu}$  tal como está descrita por la ecuación de LLG.

En las imágenes (a) y (b) se muestran respectivamente la parte de precesión de la magnetización que ya teníamos en la ecuación (2.33) y la parte de amortiguamiento que hemos introducido fenomenológicamente. El movimiento total, suma de estas dos contribuciones, se muestra en la imagen (c).

#### 2.4. Contribuciones a la energía libre

#### 2.4.1. Energía de intercambio

La energía de intercambio (directo) da cuenta de la diferencia de energía que aparece entre estados con diferentes alineaciones de espín por efecto de la repulsión coulombiana entre las partículas con espín. La mecánica cuántica nos dice que partículas idénticas con espín  $\frac{1}{2}$ , fermiones, deben tener una función de onda total antisimétrica al intercambio. Esta función de onda total va a poder descomponerse en una parte orbital y una parte de espín. Así, si la parte orbital es simétrica (antisimétrica), la parte de espín deberá ser antisimétrica (simétrica). Esto favorece un determinado alineamiento de los espines, paralelo o antiparalelo, en función del material.

Resulta interesante notar que el origen de esta energía es puramente electrostático; a pesar de lo cual es habitualmente referida como interacción magnética, por ser la principal responsable de la ordenación magnética en la materia.

Si estudiamos la situación desde la electrodinámica clásica, considerando únicamente los términos magnetostáticos descritos más abajo, estos producirían una alineación entre espines vecinos antiparalela en el plano ecuatorial (cuya dirección normal es la marcada por el espín) y paralela en la dirección del propio espín. Esto es justamente lo que sucede en sustancias paramagnéticas y diamagnéticas, que tienden a "evitar" una magnetización uniforme<sup>[3]</sup>. Sin embargo, esto no es lo que se tiene en materiales ferromagnéticos, donde es precisamente la alineación contraria (paralela) la más energéticamente favorable. Esto se traduce en una ordenación magnética del sistema que da lugar a una magnetización no nula a escala macroscópica. Lo que sucede, visto ya desde la cuántica, es que una configuración antisimétrica para la función de onda orbital de las partículas con espín lleva a una menor repulsión coulombiana entre ellas, y esto a su vez impone que la parte de espín sea simétrica, lo que en la imagen clásica se corresponde con una alineación paralela de espines.

Podemos dar cuenta de esta contribución a través del hamiltoniano de Heisenberg semiclásico, que nos da la energía de intercambio entre dos espines i y j

$$(E_{exch})_{i,j} = -J_{i,j}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{2.40}$$

donde  $J_{i,j}$  es la llamada integral de intercambio, que da cuenta de la diferencia de energía electrostática entre configuraciones de espín paralelas y antiparalelas. Hemos usado en (2.40) vectores clásicos de espín  $\vec{S}_i = S\vec{s}_i$  en lugar de operadores cuánticos  $\hat{S}_i$ , pensando ya en traducir la expresión originalmente cuántica a nuestro modelo continuo clásico.

En este punto ya se pueden extraer algunas conclusiones. Podemos fijarnos por ejemplo en qué sucede con el signo de la integral de intercambio  $J_{i,j}$ . Si tenemos que  $J_{i,j} > 0$ , vamos a tener que, para una configuración de espines paralelos, la energía de intercambio  $E_{exch}$  es negativa, y por tanto esta configuración es favorable energéticamente. Tenemos así un material ferromagnético. Es inmediato ver que el caso contrario,  $J_{i,j} < 0$ , va a favorecer una alineación de espines antiparalela, con lo que el material va a ser antiferromagnético.

Ahora podemos obtener la energía de intercambio total del sistema sumando la contribución (2.40) que teníamos para dos espines para todas las parejas de espines del material<sup>\*</sup>

$$\mathcal{U}_{exch} = -\sum_{\substack{i,j\\i\neq j}} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{2.41}$$

Es razonable limitarse en la suma a primeros vecinos<sup>\*\*</sup>, dado el rápido decaimiento con la distancia que aparece en las integrales de intercambio. Si hacemos esto y además aceptamos que la integral de intercambio es la misma para cualesquiera dos vecinos

$$J_{i,j} = J \tag{2.42}$$

podemos escribir la energía de intercambio como

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>La expresión en (2.41) es válida en la mayoría de casos de interés, pero no de forma general [20].

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup>De nuevo, esto no es general, pero sí válido en la mayoría de casos de interés.

$$\mathcal{U}_{exch} = -JS^2 \sum_{\substack{i,j\\i\neq j}} \cos \phi_{ij} \tag{2.43}$$

donde  $\phi_{ij}$  es el ángulo entre  $\vec{s_i}$  y  $\vec{s_j}$ .

Si nos apoyamos en la hipótesis de que la interacción de intercambio va a ser la dominante a cortas distancias, podemos hacer un desarrollo en serie de Taylor para  $\cos \phi_{ij}$ , ya que espines vecinos van a ser, por esta hipótesis, casi paralelos, lo que significa que el ángulo  $\phi_{ij}$  va a ser pequeño.

Quedándonos con los términos hasta orden 2 en el desarrollo y redefiniendo el origen de energías obtenemos

$$\mathcal{U}_{exch} \approx JS^2 \sum_{\substack{i,j\\i \neq j}} \phi_{ij}^2 \tag{2.44}$$

El siguiente paso hacia el modelo continuo consiste en sustituir los vectores unitarios  $\vec{s_i}$ , asociados a los dipolos magnéticos  $\vec{\mu_i}$ , por el vector unitario en la dirección de la magnetización  $\vec{m_i}$ . Entonces, en el marco de la aproximación que hemos hecho, podemos escribir el ángulo  $\phi_{ij}$  como

$$\phi_{ij} \approx \left| \vec{m}_i - \vec{m}_j \right| \approx \left| \left( \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{m} \right|$$

$$(2.45)$$

es decir, como la diferencia entre los vectores de magnetización en dos puntos vecinos. En esta expresión,  $\vec{r}_{ij}$  es el vector posición que conecta los puntos *i* y *j*. Por último, transformamos la suma en una integral

$$\mathcal{U}_{exch} = \int_{V} A\left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)^2 dV \tag{2.46}$$

de donde podemos sacar una densidad de energía de intercambio

$$u_{exch} = A \left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)^2 \tag{2.47}$$

donde aparece  $\left(\vec{\nabla}\vec{m}\right)^2 \equiv \left(\vec{\nabla}m_x\right)^2 + \left(\vec{\nabla}m_y\right)^2 + \left(\vec{\nabla}m_z\right)^2$  en coordenadas cartesianas.

Vemos que aparece también la constante de intercambio A que incluye las constantes  $J \ge S^2$ , además de una dependencia con los parámetros de estructura del material considerado.

El campo efectivo que se obtiene de esta contribución de intercambio utilizando su definición (2.25) es

$$\vec{H}_{exch} = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \left( \vec{\nabla}^2 \vec{m} \right) \tag{2.48}$$

Para terminar vamos a cuantificar la condición que hemos usado anteriormente por la que decíamos que la energía de intercambio era la dominante a *distancias cortas*.

Es posible definir, a partir de las constantes que aparecen en la expresión del campo de intercambio (2.48), una magnitud con unidades de longitud

$$l_{exch} = \sqrt{\frac{A}{\frac{1}{2}\mu_0 M_s^2}} \tag{2.49}$$

Esta distancia  $l_{exch}$ , que llamamos longitud de intercambio, es la misma que en (2.1) habíamos llamado provisionalmente  $\lambda$ . Esta longitud marca la distancia para la que la interacción de intercambio domina sobre la magnetostática, determinando la longitud característica de cambio de la magnetización. Longitudes de intercambio típicas se encuentran en el orden de los nanómetros.

#### 2.4.2. Términos magnetostáticos

Si nos restringimos, como vamos a hacer en nuestro estudio, a muestras de material pequeñas, podemos asumir que el campo magnético va a ser homogéneo en toda la muestra. También se puede suponer que el campo externo es constante o de baja frecuencia, lo que nos permite considerar también que siempre se encuentra en un estado de cuasi-equilibrio. Con estas condiciones, los únicos términos que vamos a considerar van a ser las contribuciones estáticas. Estas son la energía de interacción de Zeeman y la energía demagnetizante. O lo que es lo mismo, la energía de la magnetización en el seno de un campo magnético externo y la energía de la magnetización en el seno del campo magnético creado por la propia magnetización, respectivamente.

#### Energía de Zeeman

La energía de Zeeman da cuenta de la energía de la magnetización en un campo magnético externo  $\vec{H}_{ext}$ . Si asumimos, como ya hemos dicho, que el campo externo es uniforme y homogéneo en todo el material, entonces la densidad de energía de Zeeman es

$$u_{ext} = -\mu_0 \dot{H}_{ext} \cdot \dot{M} \tag{2.50}$$

#### Energía demagnetizante

La energía demagnetizante es la energía de la magnetización en el seno del campo magnético creado por la propia magnetización. Podemos decir por tanto que se trata de la interacción dipolo-dipolo de los dipolos elementales de los que ya hemos hablado.

Partimos de las ecuaciones de Maxwell en el caso particular en que no existen campos eléctricos  $\vec{E}$  ni magnéticos externos  $\vec{H}_{ext}$  ni corrientes eléctricas  $\vec{j}$ . Entonces tenemos

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{2.51}$$
$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0$$

Y tenemos también la ecuación que relaciona el campo de inducción magnética  $\vec{B}$  con el campo magnético  $\vec{H}$  y la magnetización  $\vec{M}$ 

$$\vec{B} = \mu_0 \left( \vec{H} + \vec{M} \right) \tag{2.52}$$

Esto transforma las ecuaciones de Maxwell (2.51) en

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$$
  
$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0$$
(2.53)

Esto significa que variaciones en la magnetización son fuentes de campos magnéticos. Este es el origen del campo que hemos llamado demagnetizante  $\vec{H}_{dmg}$ .

Podemos pensar ahora en qué situaciones vamos a tener variaciones en la magnetización. La respuesta a esta cuestión es que *en todas*. Incluso en el caso ideal de sólidos con magnetización constante, las condiciones de contorno que se deben imponer sobre la magnetización por el hecho de que el material magnetizado no es infinito llevan a que el término  $\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$  no se anule. Tenemos entonces un campo magnético dentro y alrededor del material. El nombre *demagnetizante* que se da a este campo viene de que, en el caso particular de un elipsoide de magnetización uniforme, el campo que aparece dentro del propio elipsoide es opuesto a la magnetización. Aunque esto no es cierto en general para geometrías arbitrarias, se mantiene el término demagnetizante por razones históricas.

Las condiciones de contorno que se deben imponer junto con las ecuaciones (2.53) permiten definir unas densidades de cargas magnéticas por unidad de volumen  $\rho_M(\vec{r})$  y por unidad de superficie  $\sigma_M(\vec{r})$ que se comportan como fuentes del campo de magnetización

$$\rho_M(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}) \qquad \sigma_M(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \tag{2.54}$$

donde  $\vec{n}$  es el vector normal a la superficie dirigido hacia el exterior del volumen. Con estas definiciones podemos reescribir el campo demagnetizante como

#### CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

$$\vec{H}_{dmg} = \frac{1}{4\pi} \int_{V} \frac{\rho_M\left(\vec{r'}\right)\left(\vec{r}-\vec{r'}\right)}{\left|\vec{r}-\vec{r'}\right|^3} dV' + \frac{1}{4\pi} \int_{S} \frac{\sigma_M\left(\vec{r'}\right)\left(\vec{r}-\vec{r'}\right)}{\left|\vec{r}-\vec{r'}\right|^3} dS'$$
(2.55)

La densidad de energía demagnetizante asociada a este campo es entonces

$$u_{dmg} = -\frac{1}{2}\mu_0 \vec{H}_{dmg} \cdot \vec{M} \tag{2.56}$$

Notamos este factor  $\frac{1}{2}$  que aparece por el hecho de que el campo magnético con el que interacciona la magnetización es creado por la propia magnetización. Esto se traduce en que cada interacción dipolo-dipolo en el material se cuenta dos veces al realizar la integración de la densidad de energía (2.56). Este prefactor  $\frac{1}{2}$  corrige esta circunstancia.

Un último apunte sobre las cargas de magnetización que hemos definido en (2.54). La ecuación de Maxwell para la divergencia del campo magnético,  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ , impone que la suma de las cargas de magnetización sea cero. La energía de demagnetización es además siempre positiva, lo que se traduce en que esta interacción favorece bucles cerrados para la magnetización, intentando evitar cargas magnéticas. Estos bucles cerrados son energéticamente desfavorables desde el punto de vista de la interacción de intercambio que hemos mencionado antes. La configuración de la magnetización final va a ser el resultado de un equilibrio entre la minimización de la energía de intercambio y la energía magnetostática, donde la anisotropía determina las direcciones privilegiadas de la magnetización.

#### 2.4.3. Energía de anisotropía

La estructura cristalina de un determinado material favorece (desfavorece) energéticamente la alineación de la magnetización con determinados ejes, que son llamados ejes fáciles (difíciles) de magnetización. El origen último de esta contribución energética, la energía de anisotropía, son interacciones espín-órbita, que favorecen la alineación del momento angular de espín de los electrones con su momento angular orbital, que es en última instancia lo que interacciona con la estructura cristalina del material.

Como hemos dicho, los ejes fáciles son aquellos favorables para la alineación de la magnetización. Estos ejes fáciles son adireccionales, por el requerimiento de invarianza temporal, lo que significa que la magnetización resulta igualmente favorable cuando apunta en un sentido del eje que cuando apunta en el contrario. Un mínimo energético para una magnetización  $\vec{m}_{min}$  lo es entonces también para  $-\vec{m}_{min}$ , cumpliendo además

$$E(\vec{m}_{min}) = E(-\vec{m}_{min}) \tag{2.57}$$

Esto va a ser relevante más adelante en el desarrollo como veremos.

Es posible extraer la contribución anisotrópica de la energía a partir de un modelo microscópico con la aplicación de la mecánica cuántica. Sin embargo, nosotros vamos a enfocarlo de otra forma. Por las simetrías del sistema, que nos han llevado a la ecuación (2.57), sólo pueden aparecer en el desarrollo de Taylor de la energía de anisotropía potencias pares de la magnetización<sup>[21]</sup>. Además, si nos restringimos a medios uniáxicos, como va a ser nuestro caso, el desarrollo que tengamos va a poder escribirse como

$$u_{ani} = K_0 - K_1 \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right)^2 + K_2 \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right)^4 - K_3 \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right)^6 + \cdots$$
(2.58)

donde el vector  $\vec{u}_k$  es el vector unitario en la dirección del eje de anisotropía, y las constantes  $K_i$  se determinan experimentalmente.

Despreciando en este desarrollo términos de cuarto orden y superior, nos quedamos con la expresión

$$u_{ani} = K_0 - K_1 \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right)^2 \tag{2.59}$$

En el caso en el que la anisotropía del material surge de efectos de superficie, el vector  $\vec{u}_k$ , que marca como hemos dicho el eje de anisotropía, va a coincidir con el vector normal a la superficie. Es el signo de  $K_1 \equiv K_u$  entonces el que va a determinar si esta dirección perpendicular a la superficie es un eje fácil de magnetización o un eje difícil. Valores positivos de  $K_1$  van a traducirse, según nos indica la ecuación (2.59), en la existencia de un eje fácil en la dirección perpendicular a la superficie. Valores negativos de la constante de anisotropía van a favorecer por el contrario que la magnetización se encuentre en el plano marcado por la superficie.

En cualquier caso, el campo de anisotropía viene dado por

$$\vec{H}_{ani} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right) \vec{u}_k \tag{2.60}$$

Además, es posible definir una longitud característica igual que ya se ha hecho anteriormente

$$l_K = \sqrt{\frac{A}{K_u}} \tag{2.61}$$

que mide la distancia para la que la interacción de anisotropía es la interacción dominante, marcando el tamaño máximo que pueden tener partículas monodominio.

#### 2.4.4. Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

La interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) tiene su origen en el acoplamiento espín-órbita de los electrones con la red de un cristal con una baja simetría de inversión que, en nuestro caso, está causada por la existencia de dos superficies no equivalentes. Estas dos superficies a las que nos referimos son las que existen entre el ferromagnético y un material con alto acoplamiento espín-órbita (metal pesado) y entre el ferromagnético y otra capa (aislante, en nuestro caso). En nuestro estudio es importante este término de interacción dado que favorece una determinada quiralidad en las paredes de dominio, lo que va a resultar especialmente relevante a la hora de considerar las aplicaciones tecnológicas de estos sistemas.

Este término de interacción fue introducido ya por Dzyaloshinskii en su paper de 1957, apoyándose únicamente en consideraciones de simetría para determinadas sustancias<sup>[6]</sup>. Sin embargo, su teoría no explica el origen físico de la interacción. Esto fue puesto de manifiesto por Moriya en dos papers en 1960<sup>[4, 5]</sup>. En ellos, la DMI aparece de forma natural como resultado de cálculos mecánico-cuánticos relativistas en el seno de teoría de perturbaciones en forma de un término de *superintercambio*<sup>\*</sup> anisotrópico como resultado del acoplamiento espín-órbita de los electrones con la red cristalina.

El resultado de estos cálculos mecánico-cuánticos nos dice que la DMI se puede escribir en una descripción atómica de la forma

$$E_{DMI} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{d}_{ij} \cdot (\vec{s}_i \times \vec{s}_j)$$
(2.62)

donde  $\vec{d}_{ij}$  es el vector de DMI para los átomos  $i - \acute{esimo}$  y  $j - \acute{esimo}$ ,  $\vec{s}_i$  es el vector unitario momento angular atómico del átomo  $i - \acute{esimo}$  y la suma se extiende a las parejas  $\langle i, j \rangle$ . La expresión del vector  $\vec{d}_{ij}$  depende del sistema considerado. Si nos centramos en el caso que se va a considerar en este trabajo de cintas magnéticas ultrafinas tenemos que

$$\vec{d}_{ij} = d\vec{u}_{ij} \times \vec{u}_n \tag{2.63}$$

donde  $\vec{u}_{ij}$  es el vector unitario en la dirección que une las posiciones  $i \ y \ j \ y \ \vec{u}_n$  es el vector unitario en la dirección normal a la interfaz entre la capa con fuerte acoplamiento espín-órbita y el ferromagnético, apuntando desde el primero hacia el segundo. La hipótesis de evolución lenta de la dirección del espín, esencialmente expresada en (2.1), permite escribir una forma continua para la DMI. Además, vamos a considerar que el parámetro de Dzyaloshinskii-Moriya d es constante en toda la superficie de la interfaz. Esta última aproximación está motivada por la restricción que hemos tomado sobre capas ultrafinas, cuyo espesor es menor que cualquiera de las longitudes características relevantes para el problema. Entonces se puede escribir una densidad de energía asociada a esta DMI

$$u_{DMI} = D\left[ \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \vec{\nabla} \cdot \vec{m} - \vec{m} \cdot \vec{\nabla} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \right]$$
(2.64)

La constante efectiva de DMI continua, D, con unidades de  $(J/m^2)$ , es un parámetro del material cuya relación con d depende del tipo de red del mismo. La expresión del campo de DMI se deriva de la variación de esta densidad de energía de DMI que acabamos de obtener. Así, tras algunas operaciones, podemos escribir

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Los términos de superintercambio emergen de la interacción de los espines de electrones de átomos *casi-vecinos* a través de un intermediario no magnético<sup>[17]</sup>.

$$\delta u_{DMI} = D \left[ \left( \delta \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \vec{\nabla} \cdot \vec{m} - \delta \vec{m} \cdot \vec{\nabla} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) - \delta \vec{m} \cdot \vec{\nabla} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) + \left( \delta \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \vec{\nabla} \cdot \vec{m} + \vec{\nabla} \cdot \left[ \left( \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \delta \vec{m} \right) - \left( \vec{m} \left( \delta \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) \right) \right] \right]$$

$$(2.65)$$

El término en la primera línea es el que aparece en la integral de volumen en (2.16), mientras el de la segunda línea va a la integral de superficie. El campo debido a la DMI es el que aparece con la integral de volumen

$$\vec{H}_{DMI} = \frac{2D}{\mu_0 M_s} \left[ \vec{\nabla} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_n \right) - \left( \vec{\nabla} \cdot \vec{m} \right) \vec{u}_n \right]$$
(2.66)

mientras la integral de superficie resulta en un "campo efectivo superficial"

$$\vec{H}_{DMI,S} = \frac{D}{\mu_0 M_s} \left[ \vec{m} \times (\vec{n} \times \vec{u}_n) \right] \tag{2.67}$$

donde se ha empleado para simplificar la expresión la identidad vectorial

$$a \times \left(\vec{b} \times \vec{c}\right) = \vec{b} \left(\vec{a} \cdot \vec{c}\right) - \vec{c} \left(\vec{a} \cdot \vec{b}\right)$$
(2.68)

Este término de campo superficial debe ser añadido a las condiciones de contorno. Como no se ha considerado ningún término específico de densidad de energía superficial, sólo la parte de la densidad de energía que depende de  $\vec{\nabla}\vec{m}$  aparece en las condiciones de contorno de la ecuación. Estos términos son los de intercambio y DMI

$$\vec{m} \times \frac{1}{\mu_0 M_s} \left[ 2A \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} + D\vec{m} + (\vec{n} \times \vec{u}_n) \right]$$
(2.69)

Esta ecuación debe satisfacerse para cualquier instante de tiempo, y no sólo en el equilibrio.

## Capítulo 3

# Estructura bajo estudio: *Stacks* asimétricos

Para entender el interés particular de las estructuras que centran este estudio conviene entender cuál es nuestro objetivo. La idea última es la construcción de dispositivos de almacenamiento magnético, en los que las paredes de dominio definan los diferentes bits. Esto se explicará con mayor profundidad en el capítulo 7.

Pero para que esta tecnología sea viable necesitamos ser capaces de manipular con precisión estas paredes de dominio. Estas estructuras permiten esa manipulación. Así, permiten un desplazamiento eficaz, veloz y coherente de las paredes entre dominios de forma sencilla, con la aplicación de una corriente eléctrica. Para conseguir estas propiedades trabajan de forma conjunta varias características del sistema que vamos a detallar a continuación. Es por eso que estas estructuras resultan de gran interés en el desarrollo de futuros nanodispositivos magnéticos.

#### 3.1. Acoplamiento espín-órbita

El fuerte acoplamiento espín-órbita (SOC) que existe en el metal pesado que sirve de sustrato va a cumplir dos objetivos. Primero, nos permite desplazar los dominios con la aplicación de una corriente eléctrica entre los extremos de la multicapa a través del efecto Hall de spin (SHE). El SHE hace aparecer una corriente de espín perpendicular a la interfaz entre la capa ferromagnética (FM) y la capa de metal pesado (HM), lo que se traduce en una acumulación de espín en esa interfaz<sup>[11]</sup>. Esta corriente de espín es proporcional a la densidad de corriente eléctrica en cada punto. Este SHE genera un torque de tipo Slonczewski (SL), por contraposición al torque de tipo campo (FL). La única diferencia entre estos es que el primero actúa en la dirección marcada por  $\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff})$ , mientras que el segundo lo hace en la dirección  $\vec{m} \times \vec{H}_{eff}$ . Cualquier torque compatible con la condición de normalización (2.4) puede descomponerse siempre en una componente FL y otra SL.

Es importante mencionar que este torque SL no actuaría sobre paredes de tipo Bloch, como las que serían esperables en estas geometrías en principio. Sin embargo, otra propiedad de la estructura, la

DMI, estabiliza paredes de tipo Néel<sup>[12]</sup> (además con una determinada quiralidad). Esto permite el desplazamiento de estas paredes a través del SHE.

Otro punto que merece mención es que este no es el único mecanismo por el que una corriente eléctrica podría ejercer un torque sobre las paredes de dominio. A los mecanismos tratados en el párrafo anterior se les llama torques de espín-órbita (SOT), ya que son resultado del SOC del material. Sin embargo, los electrones pueden ejercer también torque sobre la pared en forma de los llamados torques de transferencia de espín (STT). Aparecen esencialmente como consecuencia de la conservación del momento angular. Sin embargo, estos STT son varios órdenes de magnitud más pequeños que los SOT y no explican algunos resultados experimentales en estructuras de este tipo, como la velocidad del movimiento de la pared o su dirección<sup>[12]</sup>. En el presente estudio los torques de transferencia de espín son despreciados.

El segundo punto donde interviene el SOC del metal pesado es en la aparición de una interacción de Dzyaloshinskii-Moriya superficial en la superficie que separa el metal pesado del ferromagnético, como comentamos a continuación.

#### 3.2. Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

La interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) aparece como resultado conjunto de un fuerte SOC y una asimetría de inversión en el material. En nuestro caso, tenemos el fuerte SOC del metal pesado, y conseguimos la asimetría de inversión debido a la diferente naturaleza de las interfaces inferior y superior. La capa superior suele ser un óxido porque aumenta el efecto incrementando la DMI. La estructura final que tenemos es HM/FM/Ox. Esta DMI surge en nuestro caso entonces por la existencia de dos superficies no equivalentes en el material, lo que origina la asimetría de inversión, por lo que decimos que se trata de una DMI interfacial (iDMI). Esta iDMI también se observa al sustituir la capa de óxido por otra de un metal pesado, *siempre que no sea equivalente a la primera*. Podemos conseguir esto usando un metal diferente o simplemente haciendo que ambas capas tengan un espesor diferente<sup>\*</sup>, aunque se trate del mismo material. La figura 3.1 muestra esquemáticamente las estructuras a las que nos referimos.

Esta DMI resulta de vital importancia por dos motivos. Primero, porque estabiliza y promueve las paredes de tipo Néel frente a las de tipo Bloch, lo que permite desplazarlas a través del SHE. Segundo, porque además proporciona una determinada quiralidad (la misma, dependiente del signo de la DMI) a todas las paredes del material. Esto hace que todas se puedan desplazar coherentemente (en la misma dirección) en el material, de forma que no reducimos el tamaño de los dominios, como sucedería si dos paredes contiguas se desplazaran en direcciones opuestas con el mismo estímulo<sup>\*\*</sup>. Esta reducción del tamaño de los dominios que mencionamos dificultaría el desarrollo de cualquier dispositivo de almacenamiento, ya que esto se traduciría en la destrucción de la información almacenada, algo que debe evitarse.

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Siempre que sigamos hablando de láminas delgadas. Si el espesor es muy grande se pierde la asimetría de inversión. Podemos verlo en el caso límite en que ambos espesores son muy grandes. En este caso lo que tendríamos sería esencialmente una capa delgada de ferromagnético en un bloque de metal pesado, que, como ya hemos dicho, no es asimétrico.

<sup>\*\*</sup>Esto sucede de hecho cuando el estímulo es un campo magnético.


Figura 3.1: Algunas posibles estructuras en las que se puede observar iDMI.

# 3.3. Anisotropía magnética perpendicular

La anisotropía magnética perpendicular (PMA) surge como un efecto puramente superficial. En sistemas como el que consideramos aquí, prácticamente bidimensional, las contribuciones de las superficies a la anisotropía se hacen más importantes que las debidas al volumen. Así, lo que sucede esencialmente es que se establece una competitividad entre la magnetización en el plano<sup>\*</sup> (*in-plane*), motivada por los términos de anisotropía volúmicos, y la magnetización fuera del plano (*out-of-plane*), promovida por los términos superficiales (al menos en algunos materiales, como los considerados en este trabajo). A medida que el espesor de la capa ferromagnética se va haciendo más pequeño, son los términos superficiales los que van siendo cada vez más relevantes, hasta que se alcanza un punto en que la magnetización es perpendicular a la capa de ferromagnético. Esta anisotropía magnética por efectos superficiales ya fue puesta de manifiesto por Néel, en 1954<sup>[13]</sup>. La idea que subyace es que la simetría local de un átomo en la superficie es diferente a la de un átomo en el bulk del material, por lo que contribuyen de forma diferente a la energía de anisotropía<sup>[14, 15]</sup>.

El hecho de que la magnetización sea perpendicular al plano de laminación tiene aplicaciones tecnológicas importantes. Las DWs que aparecen en estos materiales con alta PMA son más delgadas, presentan campos de desanclaje mayores y, contrariamente a lo que podría pensarse dado este último dato, se desplazan con una menor corriente que las DWs que aparecen entre dominios con magnetización en el plano<sup>[16]</sup>. Esto significa que los dispositivos de almacenamiento de datos, como las memorias *Racetrack* de las que hablaremos más adelante, en los que se empleen estos materiales van a permitir una mayor densidad de información y a resultar más eficientes, consiguiendo la misma velocidad de desplazamiento que las DWs entre dominios con magnetización en el plano pero con una menor corriente, lo que se traduce en menos pérdidas por calentamiento Joule.

## 3.4. Parámetros de nuestro estudio

Para la composición particular de estos stacks, varios materiales pueden combinarse para conseguir las propiedades que se busquen en el estudio o aplicación concreto. Para el metal pesado, platino (Pt) o tántalo (Ta) son elecciones comunes, cada uno de ellos produciendo un diferente signo para el ángulo de espín Hall, que definiremos a continuación. En el ferromagnético es común usar cobalto

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>El plano al que nos referimos es el plano de laminación, el plano en el que se encuentran las interfaces.

(Co) o aleaciones del mismo con otros metales, como cobalto-hierro (CoFe) o cobalto-hierro-boro (CoFeB), aunque no son las únicas posibilidades. En cuanto a los óxidos, el óxido de aluminio (AlO) y el óxido de magnesio (MgO) se usan frecuentemente, aunque de nuevo existen otras posibilidades.

En nuestro estudio, sin embargo, no es necesario conocer el material en particular. Basta caracterizarlo con una serie de parámetros que después se introducen a la simulación y que determinan su comportamiento de forma completa. En nuestro caso estos parámetros fueron los siguientes.

Constante de intercambio, A. Define la intensidad de la interacción de intercambio (directo). Sus unidades son J/m. En nuestro caso hemos utilizado un valor  $A = 16 \times 10^{-12} J/m$ .

Primer coeficiente de anisotropía (uniaxial),  $K_1$ . Fija la intensidad de la anisotropía. Sus unidades son  $J/m^3$ . Hemos utilizado un valor  $K_1 = 0.8 \times 10^6 J/m^3$ . El signo de  $K_1$ , positivo, nos dice que el eje de anisotropía (definido a continuación) es un eje fácil de magnetización sobre el que la magnetización tenderá a orientarse.

Dirección del eje de anisotropía,  $\vec{u}_k$ . Determina la dirección de la anisotropía. En nuestro estudio este eje se corresponde con la perpendicular al plano de laminación. Elegimos esta dirección como el eje z de nuestro sistema de referencia. Así tenemos el vector unitario  $\vec{u}_k = (0, 0, 1)$ . Esta cantidad es, obviamente, adimensional.

*Parámetro de DMI*, *D*. Nos da la intensidad de la DMI. Sus unidades son  $J/m^2$ . Nosotros hemos introducido en las simulaciones únicamente DMI de origen superficial con constante  $D = -1 \times 10^{-3} J/m^2$ .

*Magnetización de saturación*,  $M_s$ . Magnetización de saturación tal como se definió en el capítulo 2 de fundamentos teóricos. Sus unidades son A/m. El valor empleado en nuestras simulaciones fue  $800 \times 10^3 A/m$ .

Parámetro adimensional de amortiguamiento de Gilbert,  $\alpha$ . Determina la atenuación de acuerdo con la ecuación de LLG (2.39). Como su propio nombre indica, es adimensional. El valor empleado en la mayoría de simulaciones ha sido  $\alpha = 0,5$ . Sólo en una de las secciones posteriores se estudia la dependencia de la dinámica con este parámetro, siendo el único de los parámetros del material que hemos variado a lo largo del trabajo.

Ángulo de efecto Hall de espín,  $\theta_{SHE}$ . Es esencialmente un parámetro que define la intensidad del SHE, proporcional a la intensidad del acoplamiento espín-órbita. Se define como el cociente entre la conductividad Hall de espín y la conductividad eléctrica multiplicado por un factor  $((e/\hbar))$  que lo hace adimensional<sup>[23]</sup>. Hemos utilizado en nuestras simulaciones el valor  $\theta_{SHE} = 0,1$ .

Parámetro lambda de asimetría de Slonczewski,  $\Lambda$ . Se trata de un parámetro adimensional que caracteriza la asimetría en el comportamiento del sistema<sup>[24, 25]</sup>. En nuestro caso hemos tomado  $\Lambda = 1$ , que se corresponde con el comportamiento simétrico.

# Capítulo 4

# Software

La ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert que hemos obtenido en el capítulo anterior resulta muy compleja<sup>\*</sup>, y raramente se conocen soluciones analíticas para un problema dado. Así, resulta en muchos casos inevitable tener que acudir a métodos numéricos aproximados para poder explorar la dinámica del sistema bajo estudio.

Existe un gran número de programas disponibles para este tipo de cálculos, tanto libres como comerciales. Nosotros damos en este capítulo unas pinceladas sobre el que se ha usado en este trabajo y sobre el método general de cálculo en el que este se basa, el método de las diferencias finitas.

## 4.1. MuMax3

El software empleado en las simulaciones ha sido MuMax3<sup>[10]</sup>, un programa de simulación micromagnética escrito en lenguaje Go y sobre tecnología CUDA. MuMax3 está entonces desarrollado para ser ejecutado en GPUs (Graphics Processing Units), que permiten técnicas de procesamiento en paralelo, con lo que se consiguen velocidades mayores de procesamiento frente a la computación basada en CPUs (Central Processing Units), limitada a cálculo secuencial por el bajo número de núcleos de las CPUs. MuMax3 tiene además una interfaz gráfica de usuario *browser-based* que permite ver el progreso de las simulaciones en tiempo real y a la vez modificar la misma simulación "sobre la marcha".

Está basado en el método de diferencias finitas (FDM). La idea esencial es discretizar el espacio con una malla rectangular uniforme con nodos  $(x_0 + i\Delta_x, y_0 + j\Delta_y, z_0 + k\Delta_z)$ . En cada uno de estos nodos se centra una celda de dimensiones  $\Delta_x \times \Delta_y \times \Delta_z$  en la que se asume que la magnetización es uniforme y trabajamos con las magnitudes promediadas en su volumen. El tamaño de celda en la discretización es un aspecto crítico del método. Este debe ser suficientemente pequeño como para que la magnetización varíe de forma suave de una a otra. Esto significa que la celda debe tener, en las tres direcciones espaciales, un tamaño menor que cualquiera de las longitudes características definidas anteriormente. En particular, su tamaño debe ser *una pequeña fracción* de la longitud de

<sup>\*</sup>Es no local por culpa del campo demagnetizante, que depende en cada punto del resto del material, y no lineal.

intercambio del material<sup>[18]</sup>.

Las ventajas que tiene el método de diferencias finitas frente a las alternativas son su fácil implementación, la sencillez de la malla a definir y, particularmente en problemas micromagnéticos, la posibilidad de acelerar el cálculo de la energía demagnetizante, cuya expresión es no local, mediante el uso de métodos de Transformada Rápida de Fourier (FFT). Esto último resulta de vital importancia en nuestro estudio y es la principal razón para elegir este método frente a las alternativas, ya que el cálculo de la energía demagnetizante es el paso de mayor coste computacional. El mayor defecto del FDM surge a raíz de la sencillez de la malla definida. Como esta debe ser uniforme, los contornos curvados se convierten al discretizar en perfiles "a escalones", dando lugar al llamado efecto *staircase*. Esto puede verse esquemáticamente en la figura 4.1. Esta limitación va a ser particularmente relevante en este trabajo por las geometrías consideradas. Otros métodos de discretización, como el método de elementos finitos, no encuentran este problema, ya que permiten celdas con diferentes formas, con lo que pueden adaptarse a geometrías arbitrarias. Sin embargo, las ventajas del FDM para nuestro caso superan con creces a las contras, gracias al empleo de la FFT.



(a) Celdas irregulares cerca del contorno de la muestra cuando se utiliza una discretización uniforme.



(b) Aproximación staircase: las celdas irregulares se sustituyen con rectángulos, resultando en un contorno en forma de diente de sierra.

Figura 4.1: Representación esquemática del efecto de staircase.

## 4.2. Método de las diferencias finitas

El objetivo último del método es resolver la ecuación adimensional de LLG (2.39) dado un campo efectivo. Vamos entonces a distinguir dos pasos bien diferenciados. El primero consiste en calcular el campo efectivo en una situación dada. Esto se hace considerando las diferentes contribuciones que ya hemos explicado en la sección 2.4. Después, este campo efectivo se introduce a la ecuación de LLG (2.39) y se obtiene la magnetización en el instante siguiente a partir de métodos de integración numéricos; en nuestro caso, Runge-Kutta de  $4^{\circ}$  orden.

El término de diferencias finitas viene de la sustitución directa que se hace de las derivadas por sus correspondientes equivalentes discretos<sup>[19]</sup>

$$\frac{dF}{dx}(x_0) = \lim_{\Delta_x \to 0} \frac{F(x_0 + \Delta_x) - F(x_0)}{\Delta_x} \simeq \frac{F(x_0 + \Delta_x) - F(x_0)}{\Delta_x}$$
(4.1)

para  $\Delta_x$  pequeño. Esto introduce un error en la evaluación de las derivadas proporcional a  $\Delta_x$ . Por lo general, usaremos diferencias centradas, que introducen un error de "sólo" segundo orden,  $o(\Delta_x^2)$ , frente al error de primer orden de las derivadas laterales. Esto significa, para el nodo  $x_i = x_0 + i\Delta_x$ 

$$\overleftarrow{F'(x_i)} = \frac{F(x_{i+1/2}) - F(x_{i-1/2})}{\Delta_x}$$
(4.2)

De igual forma podemos obtener una expresión para la derivada segunda

$$\overleftarrow{F''(x_i)} = \frac{F'(x_{i+1/2}) - F'(x_{i-1/2})}{\Delta_x} = \frac{F(x_{i+1}) - 2F(x_i) + F(x_{i-1})}{\Delta_x^2}$$
(4.3)

donde en la última igualdad se han usado de nuevo diferencias centradas en  $x_{i+1/2}$  y  $x_{i-1/2}$ .

#### 4.2.1. Campo efectivo

Calculamos las diferentes contribuciones al campo efectivo.

#### Término de intercambio

Teníamos la expresión del campo de intercambi<br/>o(2.48)que recordemos es, una vez adimensionalizado<br/>\*

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Los campos se normalizan al valor  $M_s$ , mientras que las densidades lo hacen a  $\mu_0 M_s^2$ .

$$\vec{h}_{exch} = \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \left( \vec{\nabla}^2 \vec{m} \right) \tag{4.4}$$

El problema es entonces encontrar una expresión discreta para  $(\vec{\nabla}^2 \vec{m})$ . Esto podemos conseguirlo usando una aproximación a 6 vecinos y ángulo pequeño<sup>[10]</sup> de forma que

$$\left(\vec{\nabla}^2 \vec{m}\right) \approx \sum_i \frac{\left(\vec{m}_i - \vec{m}\right)}{\Delta_i^2} \tag{4.5}$$

donde *i* recorre los 6 vecinos que consideramos de la celda central, que tiene magnetización  $\vec{m}$ .  $\Delta_i$  es el tamaño de la celda en la dirección del vecino *i*.

Es importante notar que en el contorno, algunas celdas no tienen 6 vecinos. Dicho de otra forma, faltan algunas  $\vec{m_i}$ . En este caso, usamos la propia magnetización  $\vec{m}$  de la celda central en lugar de  $\vec{m_i}$ . Esto es lo mismo que imponer condiciones de Neumann sobre el contorno.

La densidad de energía de intercambio adimensional se puede calcular después usando

$$u_{exch} = -\frac{1}{2}\vec{m} \cdot \vec{h}_{exch} \tag{4.6}$$

#### Términos magnetostáticos

El término de Zeeman es local<sup>[1]</sup>, y no plantea ningún problema. Dado un campo externo adimensional  $\vec{h}_{ext}$  la energía asociada se escribe, una vez también adimensionalizada

$$u_{ext} = -\vec{m} \cdot \vec{h}_{ext} \tag{4.7}$$

El problema viene al calcular el término demagnetizante. Este término tiene un carácter no local, con lo que debe calcularse considerando la magnetización de toda la muestra. Esto lo convierte en el paso con mayor coste computacional del cálculo. La expresión para la componente c del campo demagnetizante se puede escribir

$$h_{dmg}^{c}(i,j,k) = \sum_{c'}^{(x,y,z)} \sum_{(i',j',k') \in V} N_{cc'}(i-i',j-j',k-k') m_{c'}(i',j',k')$$
(4.8)

donde la primera suma se extiende para las tres componentes espaciales y la segunda para todas las celdas (primadas) de la muestra. Además  $N_{cc'}$  denota las componentes del tensor magnetostático.

La clave en este punto es que estas componentes sólo dependen de la distancia entre la celda sin primar y la celda primada, gracias en parte a la elección de la malla que hemos tomado. Dicho

## 4.2. MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS

de otra forma, tenemos invarianza traslacional en los coeficientes  $N_{cc'}$ . Además reconocemos en la expresión (4.8) un producto de convolución. Esto nos permite emplear Transformadas Rápidas de Fourier (FFT) para acelerar el cálculo. Utilizando que un producto de convolución en el espacio real se transforma en un producto sencillo en el espacio de Fourier lo que tenemos es

$$h_{dmg}^{c}(i,j,k) = \mathscr{F}^{-1}\left[\sum_{c'}^{(x,y,z)} \mathscr{F}\left[N_{cc'}(i-i',j-j',k-k')\right]\mathscr{F}\left[m_{c'}(i',j',k')\right]\right]$$
(4.9)

Conviene notar un detalle sobre este uso de la transformada de Fourier. Normalmente la magnetización no es periódica en los problemas estudiados. Esto significa que vamos a tener "efectos de borde" que van a dar problemas al realizar la transformada de Fourier. Para evitar esto, llenamos el espacio alrededor de la geometría que queremos estudiar con celdas de magnetización nula. Esta técnica se conoce como *zero-padding*<sup>[1, 18]</sup>.

La expresión de la energía demagnetizante es inmediata una vez tenemos el campo demagnetizante

$$u_{dmg} = -\frac{1}{2}\vec{m}\cdot\vec{h}_{dmg} \tag{4.10}$$

#### Término de interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

La DMI para el caso que consideramos de capas delgadas arroja un campo efectivo de la forma<sup>[10]</sup>

$$\vec{h}_{DMI} = \frac{2D}{\mu_0 M_s} \left[ \frac{\partial m_z}{\partial x} \vec{u}_x + \frac{\partial m_z}{\partial y} \vec{u}_y - \left( \frac{\partial m_x}{\partial x} + \frac{\partial m_y}{\partial y} \right) \vec{u}_z \right]$$
(4.11)

donde se aplican las condiciones de contorno

$$\left. \frac{\partial m_z}{\partial x} \right|_{\partial V} = \frac{D}{2A} m_x \tag{4.12}$$

$$\left. \frac{\partial m_z}{\partial y} \right|_{\partial V} = \frac{D}{2A} m_y \tag{4.13}$$

$$\left. \frac{\partial m_x}{\partial x} \right|_{\partial V} = \left. \frac{\partial m_y}{\partial y} \right|_{\partial V} = -\frac{D}{2A}m_z \tag{4.14}$$

$$\left. \frac{\partial m_x}{\partial y} \right|_{\partial V} = \left. \frac{\partial m_y}{\partial x} \right|_{\partial V} = 0 \tag{4.15}$$

$$\frac{\partial m_x}{\partial z}\Big|_{\partial V} = \frac{\partial m_y}{\partial z}\Big|_{\partial V} = \frac{\partial m_z}{\partial z}\Big|_{\partial V} = 0$$
(4.16)

Todas las derivadas se evalúan como derivadas centrales, es decir

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial i} = \frac{\vec{m}_{i+1} - \vec{m}_{i-1}}{2\Delta_i} \tag{4.17}$$

Cuando en el contorno  $\partial V$  falta algún vecino, se sustituye su magnetización por

$$\vec{m} + \frac{\partial m}{\partial i} \bigg|_{\partial V} \Delta_i \vec{n} \tag{4.18}$$

donde  $\vec{m}$  es la magnetización de la celda central y  $\vec{n}$  el vector normal a la superficie. La correspondiente condición de contorno se elige para cada caso entre (4.12)-(4.16).

Estas mismas condiciones de contorno se emplean también para el término de intercambio en el caso en que  $D \neq 0$ .

Una vez calculado el campo, simplemente podemos obtener la densidad de energía correspondiente

$$u_{DMI} = -\frac{1}{2}\vec{m}\cdot\vec{h}_{DMI} \tag{4.19}$$

#### Término de anisotropía

El término de anisotropía no plantea ninguna dificultad. Si nos quedamos en el primer orden de anisotropía uniáxica podemos escribir el campo efectivo asociado a esta contribución

$$\vec{h}_{ani} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s^2} \left( \vec{m} \cdot \vec{u}_k \right) \vec{u}_k \tag{4.20}$$

La densidad de energía de anisotropía se calcula entonces igual que para las anteriores contribuciones

$$u_{ani} = -\frac{1}{2}\vec{m} \cdot \vec{h}_{ani} \tag{4.21}$$

### 4.2.2. Integración numérica: RK4

Una vez calculado el campo efectivo, nos disponemos a resolver de forma numérica la ecuación de LLG (2.39), partiendo de una magnetización inicial dada. Para ello pueden emplearse muchos algoritmos. MuMax3 permite elegir entre varios de ellos. Nos limitamos aquí sin embargo a dar unas breves pinceladas sobre el método de Runge-Kutta de  $4^{\circ}$  orden, que ha sido el que hemos utilizado en nuestras simulaciones.

#### El problema que tenemos es

$$\frac{d\vec{m}}{dt}(t) = f(t, \vec{m}(t)) ,$$

$$\vec{m}(t_0) = \vec{m}_0$$
(4.22)

Si llamamos  $\vec{m}_n = \vec{m}(t_n)$  a la solución exacta de la ecuación en el instante de tiempo  $t_n = t_0 + n\Delta_t$ , una solución aproximada para el instante de tiempo  $t_{n+1}$  viene dada por

$$\tilde{\vec{m}}_{n+1} = \vec{m}_n + \sum_{i=1}^s b_i \vec{k}_i \tag{4.23}$$

donde

$$\vec{k}_{1} = \Delta_{t} f(t, \vec{m}_{n})$$

$$\vec{k}_{i} = \Delta_{t} f\left(t + c_{i} \Delta_{t}, \ \vec{m}_{n} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \vec{k}_{j}\right), \quad i = 2, 3, \dots, s$$
(4.24)

Los coeficientes  $a_{ij}$ ,  $b_i$  y  $c_i$  determinan el método de Runge-Kutta completamente, variando su expresión de método a método. Se suelen escribir en una matriz de Butcher como la de la tabla 4.1.

Tabla 4.1: Matriz de Butcher general.

Si nos quedamos en particular con el método RK4, su matriz de Butcher entonces es la que se muestra en la tabla 4.2.

Tabla 4.2: Matriz de Butcher para el método RK4.

La idea esencial de estos métodos de Runge-Kutta consiste en evaluar la derivada temporal de la magnitud a integrar en varios puntos intermedios dentro del paso de tiempo total entre  $t_n$  y  $t_{n+1}$ , de forma que el incremento en el instante  $t_{n+1}$  se calcule al final como una media ponderada de los incrementos intermedios calculados.

Un apunte importante de este método de RK4 para el caso particular que nos ocupa es que no conserva el módulo de la magnetización<sup>[1]</sup>. Esto significa que después de cada paso del código tendremos que renormalizar la magnetización calculada para que se siga verificando la ecuación (2.4).

# Capítulo 5

# Resultados

El objetivo de este estudio es caracterizar, a partir de los datos obtenidos de simulaciones micromagnéticas, la dinámica de las paredes entre dominios magnéticos en stacks asimétricos como los descritos en el capítulo 3, centrándonos particularmente en geometrías en las que existe una cierta curvatura. Estas geometrías con las que vamos a trabajar aparecen en la figura 5.1, junto con las cantidades geométricas relevantes que vamos a variar en el estudio, la anchura y el radio interior en tiras curvas. Estas estructuras ya han sido estudiadas experimentalmente, aunque siempre con tamaños mayores a los que se presentan en este trabajo<sup>[28]</sup>.



(b) Tira curva

Figura 5.1: Geometrías utilizadas en el estudio.

## 5.1. Efectos numéricos

Por tratarse este de un estudio puramente computacional, uno de los mayores problemas al que nos enfrentamos es distinguir los efectos numéricos que aparecen por el procedimiento de discretización y simulación del sistema de los efectos físicos reales. Así, lo primero que vamos a hacer es tratar de comprender estos efectos introducidos por nuestro método computacional para después poder tenerlos en cuenta a la hora del posterior análisis y así extraer la información física real del problema.

Dentro de estos efectos de la simulación, dos van a destacar especialmente, ambos con origen en la discretización del espacio. El primero se debe al tamaño de la celda de discretización. Este tamaño afecta de forma sensible a las velocidades calculadas de las DWs como veremos. El segundo efecto es el efecto staircase, que ya hemos mencionado. Este segundo efecto aparece al aproximar contornos

curvos de nuestra geometría por perfiles escalonados, lo que también afecta al movimiento de las DWs.

### 5.1.1. Efecto del tamaño de celda

El efecto del tamaño de celda se puede estudiar en el caso de la tira recta, de forma que vamos a empezar por ahí, por ser el caso más sencillo. Hemos simulado tiras rectas de distintas anchuras con diferentes tamaños de celda, desde los 0,25nm de lado hasta los 4nm<sup>\*</sup>. Algunos pasos de la simulación pueden verse en la figura 5.2.



Figura 5.2: Diferentes pasos de una simulación para una cinta de longitud L = 512nm en los que se representa la componente de la magnetización perpendicular al plano de la tira,  $m_z$ . Anchura w = 64nm. Tamaño de celda c = 0,25nm.

Los resultados pueden verse representados en la figura 5.3. Se observa una cierta variación de entorno al 6 % de la velocidad con el tamaño de la celda en la simulación, aumentando la velocidad conforme se reduce el tamaño de la celda. Se observa además que las velocidades parecen converger cuando el tamaño de celda se hace muy pequeño. Si no tuviéramos esta convergencia, el estudio no sería posible, ya que esto significaría que nuestros resultados dependen de la discretización que tomemos, algo que no tiene significado físico ya que esta discretización no tiene una existencia real. Vemos también que a medida que se reduce el tamaño de celda también lo hace el ruido de la velocidad de la DW. Esto sucede principalmente por el ruido de alta frecuencia que se incrementa al hacer la derivada numérica en el cálculo de la velocidad.

Pero un mallado más fino también significa mayor número de celdas y mayor tiempo de computación. La opción elegida en cada caso buscó siempre un compromiso entre la resolución obtenida en las simulaciones y el tiempo de computación de las mismas. Así, hemos elegido como tamaño de celda "estandarizado" c = 0,5nm, que se asume de ahora en adelante como el tamaño de celda empleado en las simulaciones salvo que se indique lo contrario.

El error relativo cometido al elegir el tamaño c = 0,5nm en lugar de c = 0,25nm es inferior al 0,2%. Con esto y viendo el ritmo de convergencia que se observa en la figura 5.3, podemos decir con un buen grado de certeza que el error relativo que nos introduce este efecto cuando utilizamos para el cálculo el tamaño c = 0,5nm estará en cualquier caso por debajo del 0,4% respecto del valor real<sup>\*\*</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Las celdas con las que hemos trabajado han sido siempre prismas de base cuadrada, todas ellas con un espesor de 0,6nm, el espesor de la capa de FM (consideramos una única celda de espesor).

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup>Recordemos que estamos en el marco de un modelo en que las magnitudes son funciones continuas, por lo que el valor real obtenido en este modelo se obtendría en el límite c = 0nm, que resulta inalcanzable computacionalmente.



Figura 5.3: Comparación de la velocidad de una DW en una tira recta para una anchura de w = 64nm y distintos tamaños de celda c.

La misma dependencia de la velocidad con el tamaño de celda que se observa para una tira de anchura w = 64nm en la figura 5.3, se puede observar también para anchuras de w = 32nm y w = 96nm en las figuras 5.4 y 5.5 respectivamente.



Figura 5.4: Comparación de la velocidad de una DW en una tira recta para una anchura de w = 32nm y distintos tamaños de celda c.

Además, llegado a este punto sería más lógico hacer las simulaciones ab initio átomo a átomo.



Figura 5.5: Comparación de la velocidad de una DW en una tira recta para una anchura de w = 96nm y distintos tamaños de celda c.

#### 5.1.2. Efecto *staircase*

El segundo efecto numérico importante es el efecto staircase. Como ya se ha explicado en el capitulo 4, este surge en nuestro caso de aproximar bordes curvos por contornos a saltos, aunque también puede apreciarse en cintas rectas con una disposición en la que los lados de la cinta no sean paralelos al mallado. Los resultados se representan en la figura 5.6. Vemos claramente que la velocidad en el caso sin staircase es mayor. La explicación a esto radica en que los contornos rugosos de las cintas con staircase sirven como "puntos de anclaje" (*pinning*) para la magnetización, ralentizando su avance. Vemos además que existen diferencias entre el caso a 45° y a 30°. El primero parece mucho más regular y suave. Esto es así porque los saltos en el contorno de la cinta a 45° son más "regulares" que en la cinta a 30°. En la cinta inclinada 45° los saltos se alternan uno en la dirección x y otro en la dirección y. Sin embargo, en la de 30° alternan, aproximadamente, tres en una dirección y dos en la otra. Esto puede verse representado en la figura 5.7 para las dos inclinaciones que hemos probado.

Puede ser también de interés ver qué forma toma este efecto staircase en el caso en que tenemos bordes curvos ya. En particular, vamos a centrarnos en una corona circular en la que se disponen dos dominios, cada uno en una semi-corona. Gracias a que tenemos el movimiento coherente que ya hemos mencionado en la sección 3, la "velocidad" que vamos a obtener va a ser en realidad la *diferencia de velocidades* de ambas paredes, Down-Up y Up-Down<sup>\*</sup>. La definición de cada tipo de pared se hace tomando un sentido de giro de referencia, de forma que si recorriendo la cinta en este sentido elegido encontramos, por ejemplo, un dominio con magnetización *Down*, después la pared y a continuación un dominio con magnetización Up, la pared que tenemos será del tipo *Down-Up*, o DU. Esto queda ilustrado en la figura 5.8.

La situación inicial de la configuración que describimos en el párrafo anterior se ve en la figura 5.9.

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Las velocidades van a ser ligeramente diferentes para estos dos tipos de pared en tiras curvas, como veremos más adelante. Esto ya se ha comprobado de forma experimental<sup>[28]</sup>.



Figura 5.6: Velocidad de la pared para una tira recta de anchura w = 64nm para inclinación con respecto a la malla 0° (sin staircase), 30° y 45°.







Figura 5.8: Ilustración de ambos tipos de pared, definidos una vez elegido el sentido de giro de referencia el de las agujas del reloj ("Clockwise", CW).

Así, al introducir corriente las dos paredes van a desplazarse en el mismo sentido de giro, con lo que la magnetización variará con una velocidad que será la diferencia de la velocidad para la pared tipo DU y la velocidad para la pared tipo UD. Para estas tiras curvas se tuvo en cuenta que la densidad de corriente no es uniforme, sino que depende inversamente de la distancia al centro de la curva. Esta velocidad de variación de la magnetización se puede ver representada en función del tiempo en la figura 5.10. Lo más destacado de la gráfica son los descensos bruscos que se observan con una periodicidad de aproximadamente 2ns. Si nos fijamos en la posición de los dominios en esos instantes de tiempo vemos una clara correlación entre ellos. Algunos de estos instantes de tiempo aparecen en la figura 5.11. Lo que observamos es que estos descensos bruscos en la gráfica se corresponden de forma casi perfecta con los instantes en que las paredes, que se encuentran en posiciones casi diametralmente opuestas en todo momento, pasan por los puntos en los que el mallado es tangente a la curva descrita por la geometría, con lo que la curva *está mejor aproximada*.



Figura 5.9: Situación inicial de la dinámica.



Figura 5.10: Diferencia de velocidades (en valor absoluto) entre ambos tipos de pared recorriendo una corona circular. La cinta tiene una anchura de w = 64nm y el radio interior de la corona es  $r_i = 3 w$ .

La hipótesis de que esta es la explicación de estos descensos bruscos se reafirma cuando vemos cómo va evolucionando la forma del pico en el tiempo. Se observa claramente cómo los primeros picos son mucho más agudos que los últimos. Esto está de acuerdo con nuestra explicación del fenómeno. A



Figura 5.11: Instantes de tiempo seleccionados de una simulación de corona circular con anchura w = 64nm y radio interior  $r_i = 3 w$ .

medida que una pared va ganando terreno a la otra, ambas pasan en instantes ligeramente distintos por los puntos que podemos llamar de mejor aproximación, con lo que se estira la "turbulencia" producida por ese cambio curva-recta. Nuestro pequeño modelo explica también por qué el pico aparece siempre reduciendo la velocidad (en valor absoluto), aunque para ello son necesarios datos y resultados presentados más adelante en el trabajo. Nos quedamos satisfechos en este punto, sin embargo, con haber puesto de relieve el efecto producido por el efecto staircase.

Decir también que este efecto staircase es visible a lo largo de toda la gráfica, siendo el responsable de las oscilaciones que se observan, y no sólo en los picos en los que hemos hecho hincapié. De forma general hemos dicho además, el efecto staircase va a tender a frenar la pared, produciendo un pinning de la misma en los contornos de la cinta. Así, la velocidad real de la pared es algo superior al promedio de las oscilaciones que vemos representadas<sup>\*</sup>. Veremos también además que este efecto de pinning es más importante cuanto más estrecha sea la cinta, ya que el contorno de la misma no crece con la anchura pero su superficie crece con w, por lo que se puede esperar que el efecto de este pinning en la velocidad se reduzca con la anchura. Esto se manifestará en forma de un menor ruido para anchuras mayores, lo cual podremos ver en las gráficas, y en una menor subestimación de la velocidad calculada también para mayores anchuras. Esto se traducirá en que, para cintas de diferentes anchuras en que la velocidad real de la pared sea la misma, nosotros calcularemos una velocidad ligeramente menor para cintas más estrechas frente a las más anchas.

### 5.1.3. Cálculo de la velocidad

Hasta ahora no hemos mencionado el cálculo explícito que hemos hecho de la velocidad de la pared, pero merece un breve comentario. Lo primero de lo que tenemos que darnos cuenta es de que la pared es un objeto extenso, y no algo puntual. Podemos intentar hacer una analogía con la mecánica clásica. Supongamos que tenemos un sistema extenso del que queremos conocer su velocidad. Entonces, calculamos esa velocidad sumando las velocidades de cada punto del sistema y haciéndola actuar sobre su centro de masas. Sin embargo, al intentar aplicar esto al caso de las DWs, aparecen varios problemas, como el de definir la masa de una DW. En particular para el caso en el que nos vamos

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Si la tira fuese perfecta. En la realidad, siempre vamos a tener una rugosidad de la tira junto con pequeñas inhomogeneidades del material. Estas imperfecciones pueden simularse computacionalmente introduciendo un "staircase aleatorio", haciendo la tira más ancha en algunos puntos y más estrecha en otros.

a centrar, cabe preguntarse qué sentido tiene hablar de velocidad (lineal) en el caso en que la pared recorre una trayectoria curva, ya que en este caso cada punto de la pared tiene una velocidad diferente. Esto no sucede en el caso de la tira recta una vez se ha superado el régimen transitorio.

Así, vamos a tomar la velocidad de la pared como el promedio de velocidad de todos los puntos de la pared. El problema entonces es sumar la velocidad lineal en cada punto de la pared y dividir entre la anchura. Sin embargo, esto se puede hacer de una forma mucho más sencilla. Una vez alcanzado el régimen estacionario, la forma de la pared no cambia. Esto significa que todos los puntos de la pared tienen la misma velocidad angular, lo que se traduce en que la velocidad lineal de los puntos de la pared aumenta de forma lineal con el radio. Si realizamos el cálculo tal como lo hemos descrito, es inmediato ver que el resultado no es nada más que la velocidad en el punto medio de la cinta. Este es el valor que vamos a llamar velocidad de la pared para el caso de cintas curvas, es decir

$$v_{DW} = v(r)\Big|_{\bar{r}=r_i+w/2}$$
 (5.1)

## 5.2. Resultados físicos

Teniendo estos efectos numéricos en cuenta, podemos ya analizar los resultados desde el punto de vista físico. Analizaremos cómo diferentes parámetros involucrados en la dinámica afectan al desplazamiento de las DWs.

#### 5.2.1. Dependencia con la anchura de la cinta

Uno de los primeros resultados que se pueden observar es la dependencia de la velocidad de la pared con la anchura de la cinta, incluso en tiras rectas. Esto se representa en la figura 5.12. Lo que obtenemos parece indicar que la velocidad aumenta ligeramente conforme se reduce la anchura de la cinta.

La situación cambia para tiras curvas, como se ve en la figura 5.13. El mayor ruido se debe al efecto staircase, que no existe en tiras rectas. Lo más destacado sin embargo es que se observan comportamientos diferentes para la pared tipo DU y para la pared tipo UD. En la primera la dependencia es inversa a la que teníamos en tiras rectas, es decir, la velocidad crece con la anchura de la cinta. En la segunda recuperamos la dependencia que teníamos con las tiras rectas.

Conviene fijarse en cualquier caso de qué orden son las diferencias de las que estamos hablando. Las mayores que podemos encontrar, fijándonos dentro de cada grupo por separado, rondan los 10m/s. Esto es algo más de un 5% de la velocidad de las paredes, aproximadamente. Con esto queremos destacar que se trata en todo caso de diferencias pequeñas, aunque existentes. De nuevo, es especialmente notable el cambio en la dependencia con la anchura que se observa entre la pared tipo DU y la tipo UD en tiras curvas.



Figura 5.12: Dependencia de la velocidad de la pared con la anchura para una tira recta. Tamaño de celda c = 0.25nm.

### 5.2.2. Dependencia con el tipo de pared

El siguiente resultado que vamos a comentar ya se puede prever a partir de lo expuesto en la sección anterior. Este es la diferencia de velocidad que existe entre los dos tipos de pared, DU y UD. Esto puede verse en la gráfica de la figura 5.10, donde obtenemos un valor de la "velocidad" distinto de cero. Esta velocidad es simplemente la diferencia de velocidades entre la pared que tiende a aumentar la magnetización en el eje z y la que tiende a reducirla. Así, en el sentido de las agujas del reloj esto es  $v_{CW} = v_{UD} - v_{DU}$  y en el sentido contrario se introduce un cambio de signo:  $v_{CCW} = v_{DU} - v_{UD}$ . Si comparamos entonces la situación de rotación en sentido de las agujas del reloj (CW) con el sentido contrario (CCW) lo que obtenemos se ve representado en la figura 5.14.

Observamos cómo la velocidad cambia de signo al cambiar el sentido de giro. El signo de la velocidad nos indica el balance entre los dominios, cuál crece y cuál se reduce. El hecho de que esta velocidad cambie de signo al cambiar el sentido de giro nos dice que es *el mismo tipo de pared*<sup>\*</sup> el que avanza más rápido, independientemente del sentido de giro. Definiendo el sentido de giro de referencia el de las agujas del reloj<sup>\*\*</sup>, la pared que tiene una mayor velocidad es la de tipo DU.

En la gráfica de la figura 5.14 se ha representado el resultado para una anchura de w = 64nm. Lo mismo puede hacerse para diferentes anchuras. En las imágenes (a) y (b) de la figura 5.15 puede verse la situación para unas anchuras de w = 32nm y w = 128nm respectivamente. Nótese el cambio de escala en el eje vertical entre las figuras 5.14 y 5.15. Lo que este resultado nos dice es que la diferencia de velocidad entre la pared tipo DU y la pared tipo UD aumenta con la anchura de la cinta, como era de esperar.

Para finalizar esta sección, vamos a comparar directamente la velocidad de los tres tipos de DWs

<sup>\*</sup>Recordar que tenemos  $v_{CW} = v_{UD} - v_{DU}$  y  $v_{CCW} = v_{DU} - v_{UD}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup>Se asume de ahora en adelante a no ser que se indique lo contrario explícitamente.



Figura 5.13: Dependencia de la velocidad de la pared (a) tipo DU (b) tipo UD con la anchura en cintas curvas con  $r_i = 3w$ .

que podemos tener, dos (DU y UD) en tiras curvas y uno en tiras rectas<sup>\*</sup>. El criterio que hemos considerado para decir que dos simulaciones son "comparables" ha sido mantener la densidad media de corriente constante<sup>\*\*</sup>.

Necesitamos obtener directamente la velocidad de cada pared, y no diferencias de velocidades entre ellas. Simulamos entonces para el caso curvo una geometría como la representada en 5.8, donde aparece una única pared que será de la que midamos su velocidad. Para la tira recta la situación está representada en 5.2. Ya hemos observado que existe una dependencia con la anchura de la cinta, por lo que vamos a comparar siempre cintas con la misma anchura. Los resultados están representados

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>En el caso de la tira recta también es posible definir dos tipos de pared (DU y UD) definiendo un sentido de referencia sobre la cinta. Sin embargo, ambos tipos de pared tienen la misma velocidad (en el caso en que la corriente es colineal a la cinta) y por tanto no los diferenciamos en este caso.

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup>Recordar que los torques son proporcionales a las densidades de corriente.



Figura 5.14: Diferencia de velocidades para los dos sentidos posibles de giro en una geometría como la representada en 5.9. Anchura w = 64nm, radio interior  $r_i = 3w$ .

en la gráfica de la figura 5.16 para una anchura de 96nm. Vemos cómo tenemos el desdoblamiento de la velocidad para los dos tipos de paredes curvas que ya esperábamos a raíz de los resultados presentados anteriormente. Además vemos que la velocidad de la tira recta se encuentra entre las de las dos paredes curvas. El orden, de mayor a menor velocidad es tipo DU, recta, tipo UD.

Sin embargo, hemos dicho ya en la anterior sección 5.2.1 que los diferentes tipos de pared tienen diferentes dependencias con la anchura de la cinta. Esto significa que la situación podría cambiar al cambiar las dimensiones de las cintas. Esto es efectivamente lo que se observa. Se ha representado la misma información para una anchura menor (48nm) y otra mayor (128nm) en la figura 5.17.

Observamos dos cosas. Primero, la pared UD es siempre la más lenta de las tres, al menos en el rango que hemos muestreado, entre los 32nm y los 128nm. No esperamos sin embargo que esto cambie. La pared UD y la recta tienen el mismo comportamiento con la anchura, por lo que parece difícil que puedan cambiar sus posiciones. Además, el que cambiaran sus posiciones significaría una dependencia con la anchura del mecanismo que hace que la pared recta sea más rápida que la tipo UD. Lo mismo sucede con la pared DU, por lo que tampoco esperamos que sus posiciones se inviertan.

Y segundo y más notable, la diferente dependencia con la anchura que tienen la pared DU y la pared recta permite, y de hecho lo observamos para una "anchura crítica", que la pared recta pasa a ser la más rápida, superando a la DU. Así, la pared DU es más rápida que la recta a anchuras "grandes" y la recta resulta más veloz para anchuras "pequeñas". Esta anchura crítica está, de acuerdo con nuestras simulaciones, alrededor de los 64nm.

Esta diferencia de velocidades entre los tres tipos de pared ya ha sido observada de forma experimental recientemente<sup>[28]</sup>, aunque siempre para cintas de tamaños mayores.



Figura 5.15: Diferencia de velocidades para CW/CCW en una corona circular con radio interior  $r_i = 3w$  y anchura (a) w = 32nm (b) w = 128nm. La diferencia en la duración de la señal está relacionada con la diferente elección de condiciones de finalización de la simulación, y no con un efecto físico.

### 5.2.3. Dependencia con la curvatura

Podemos también estudiar cómo afecta la curvatura a la velocidad de las paredes en los diferentes casos. Los resultados obtenidos aparecen representados en la figura 5.18. Vemos que la velocidad de la pared crece conforme disminuye la curvatura. Conviene antes definir la curvatura, a. Nuestra definición va a ser  $a^2 = r_o/r_i$ . Es decir, el cuadrado de la curvatura es el cociente entre el radio exterior de la corona circular y el radio interior. Es fácil ver que esta curvatura se puede reescribir en el caso  $r_i = kw$  como  $a^2 = 1 + 1/k$ .

Parece fácil ver a partir de los resultados en 5.18 que la velocidad crece linealmente con el factor k, tal como este se ha definido antes. Los mismos resultados se obtienen para la pared tipo UD.



Figura 5.16: Comparación de velocidades entre tira recta y tira curva. Se ha utilizado un tamaño de celda c = 0.25nm en todos los casos. En las tiras curvas además  $r_i = 3w$ .

También es interesante ver qué sucede con la diferencia de velocidad entre las paredes DU/UD. Esto es lo que se ha representado en la figura 5.19. Vemos cómo la diferencia de velocidad crece conforme se reduce la curvatura. Uno podría pensar inicialmente que ambas velocidades deberían acercarse, pues ambas deberían tender al caso de la tira recta cuando se hace el radio tender a infinito. Recordemos que cuando hacemos tender el radio interior a infinito, la curvatura, con la definición que hemos adoptado, tiende a uno, que es el caso de la tira recta.

### 5.2.4. Deformación de la pared

Otra cuestión que resulta interesante estudiar es la forma que toma la pared en su desplazamiento. En las tiras rectas hemos visto ya en la figura 5.2 que la pared queda recta e inclinada en un estado que llamamos de *tilting*. En las tiras curvas como las que se ven en 5.8 vemos cómo la pared parece recta también y está inclinada de diferente forma con respecto al caso recto. Ahora bien, en estas tiras curvas nos hemos limitado hasta ahora a un caso de curvatura relativamente pequeña. Recordemos que definimos (el cuadrado de) la curvatura como el cociente entre el radio exterior y el radio interior de la corona circular,  $a^2 = r_o/r_i$ . Así, con la relación  $r_i = 3w$  que hemos venido usando, esto se traduce en una curvatura  $a^2 = 4/3$ . Vamos ahora a abandonar esta ligadura, aumentando la curvatura hasta  $a^2 = 3$ , donde los efectos de la curvatura deberían ser más notables.

Así, los tres tipos de pared de los que hemos hablado aparecen en la figura 5.20. En las tiras curvas tenemos curvatura  $a^2 = 3$ , utilizando  $r_i = w/2$ . En todos los casos representados la anchura de la cinta es de 128nm.

Observamos ahora mucho mejor la forma de cada una de las paredes. Vemos cómo las paredes en las tiras curvas no son rectas sino que están deformadas, tomando además una diferente forma en función del tipo de pared.



Figura 5.17: Comparación de velocidades entre tira curva DU/UD y tira recta para dos anchuras diferentes: (a) 48nm (b) 128nm. En las tiras curvas  $r_i = 3w$ . Las velocidades están en valor absoluto.

Las diferentes formas que vemos en las tiras curvas pueden explicarse como una suma de tres términos. Tenemos por un lado el tilting que se ve también en la tira recta y que depende del tipo de pared, como se ve en la figura 5.21. El tipo de pared en la tira recta sigue un criterio similar al que tenemos en tiras curvas. Una vez definido un sentido de referencia en la dirección de la cinta es inmediata la definición de las paredes tipo UD y DU. Este tilting aparece de forma general en sistemas con alta DMI, independientemente del mecanismo de desplazamiento de la pared<sup>[22]</sup>. El diferente signo que toma el término de tilting en función del tipo de pared va a resultar crítico en la velocidad de desplazamiento de estas paredes, como explicaremos un poco más adelante.

La segunda contribución aparece por la diferente densidad de corriente que circula por la zona interior de la corona y por la zona exterior. Como el torque ejercido sobre la pared es proporcional a esta densidad de corriente<sup>[22]</sup> y la velocidad lineal lo es a su vez a este torque, la pared avanza más rápido por la parte interior de la corona.



Figura 5.18: Dependencia de la velocidad con la curvatura para pared tipo DU. En todos los casos w = 64nm. Tamaño de celda c = 0.25nm.



Figura 5.19: Comparación de velocidades para los dos tipos de pared en cintas con diferentes curvaturas. En todos los casos w = 64nm. Tamaño de celda c = 0,25nm.

La tercera y última contribución viene de la relación que existe entre la velocidad angular y la velocidad lineal. Los puntos en el interior de la corona se mueven angularmente más rápido que los exteriores para una misma velocidad lineal. Es importante distinguir este término del anterior. El anterior es un efecto de la corriente, inhomogénea por culpa de la curvatura de la cinta. El segundo es un efecto puramente geométrico que surge de la relación entre la velocidad lineal y la angular.

Así, podemos intentar simular cada uno de ellos por separado. El tilting es el más sencillo de simular y de hecho ya lo hemos presentado en la figura 5.21, por lo que no vamos a hablar más de él. Simplemente vamos a hacer un breve comentario al respecto. En el estudio a continuación vamos a

Figura 5.20: Forma de las paredes en función del tipo de pared. En las cintas curvas el sentido de giro elegido ha sido CW y además  $r_i = w/2$ . La anchura es siempre 128nm.

(b) UD CW



Figura 5.21: Tilting en función del tipo de pared. Anchura 112nm. El sentido de avance de la pared es de izquierda a derecha.

intentar separar las diferentes contribuciones a la deformación de la pared, pero realmente es el tilting el único que realmente podemos separar. En las demás simulaciones vamos a ir siempre arrastrando el tilting, que como hemos dicho aparece de forma general en el desplazamiento de paredes en sistemas con alta DMI.

Siguiendo con las contribuciones que hemos comentado ya, para simular el segundo efecto al que nos referíamos antes hemos introducido en una tira recta la misma corriente inhomogénea que aparecería al curvar la cinta. La forma de las paredes resultantes se puede ver en las imágenes de la figura 5.22. El lado exterior de la corona se correspondería con el lado superior de la cinta, tal como se presenta la imagen. Aunque sí se aprecia que la pared ya no es perfectamente recta como en las imágenes de 5.21, tampoco alcanza obviamente una curvatura tan apreciable como en las tiras curvas de la figura 5.20. Lo más notable es la diferencia que aparece entre un tipo de pared y el contrario. Vemos que en el caso de la pared DU, la acción combinada resulta en una pared prácticamente recta, perpendicular al sentido de avance de la misma pero con una pequeña curvatura. En el caso de la pared UD, sucede justo al contrario, ambas contribuciones se suman resultando en una pared mucho más inclinada que en la tira recta, también con una cierta curvatura.





(a) Tilting + Corriente en pared tipo DU.

(b) Tilting + Corriente en pared tipo UD.

Figura 5.22: Deformación combinada de tilting y corriente inhomogénea en tiras rectas. El radio interior de la corona se correspondería con el lado inferior de la cinta en las imágenes. Anchura w = 112nm. Curvatura simulada  $a^2 = 3$ .

(a) DU CW

#### 5.2. RESULTADOS FÍSICOS

El último efecto, de origen puramente geométrico, lo hemos simulado sobre tiras curvas introduciendo en ellas una densidad de corriente homogénea. Los resultados se representan en la figura 5.23. Una vez más, tenemos que arrastrar el efecto del tilting. Vemos aquí algo parecido a lo que teníamos en 5.22. Este efecto suma su contribución a la del tilting para la pared UD, mientras que ambas contribuciones se compensan para la pared DU, resultando en una pared mucho menos deformada en este último caso.



(a) Tilting + Geometría en pared tipo DU.



(b) Tilting + Geometría en pared tipo UD.

Figura 5.23: Deformación combinada de tilting y geometría curva. Anchura w = 128nm. Curvatura  $a^2 = 3$ . Sentido de avance de la pared CW.

La forma final que toma la pared no es nada más entonces que la suma de estas tres contribuciones.

Podemos, para cerrar este tema, representar algunos resultados cuantitativos que nos den una idea de cómo afectan las diferentes contribuciones que deforman la pared a la velocidad de la misma. En la figura 5.24 se ven representadas velocidades de pared para diferentes configuraciones de las descritas en estos párrafos.

Así, comparamos en la gráfica (a) la velocidad de la pared en la tira recta normal (sólo tilting) con la que adquiere cuando introducimos una corriente inhomogénea, también en la tira recta. Vemos que la velocidad cambia notablemente de un tipo de pared a otra, quedando la tira recta en posición intermedia entre las dos paredes curvas. Conviene destacar que la anchura elegida ha sido 128nm, lo cual es relevante por lo que hemos comentado anteriormente referente a la inversión de velocidades que podía darse entre la pared recta y la tipo DU. Comparando con los datos presentados entonces vemos que para esta anchura nos encontramos en el tramo en que la pared DU es más veloz que la pared recta. Esto es lo mismo que podemos observar aquí.

En la gráfica (b) intentamos diferenciar el efecto introducido por la geometría. Comparamos entonces las tiras curvas normales, con tiras curvas en las que la densidad de corriente introducida era homogénea y con la tira recta. De aquí se pueden sacar diferentes informaciones. Lo más evidente a simple vista es la clara diferencia que existe entre las paredes UD y las demás. Dentro de estas, la que tiene una densidad de corriente homogénea tiene una velocidad ligeramente mayor, como era esperable. Después vemos que la pared DU con la corriente normal es la más veloz de las paredes comparadas. Esto también está en concordancia con lo que hemos obtenido en las secciones anteriores. Destacamos de nuevo que estamos considerando una anchura de 128nm. Pero lo más interesante de esta segunda gráfica se observa al comparar la velocidad de la pared recta con la de la pared DU con corriente uniforme. Estas dos velocidades son prácticamente idénticas, lo que nos estaría diciendo que la parte de la deformación asociada a la curvatura apenas contribuye a la velocidad de la pared en este caso. Sin embargo, sí existe una diferencia grande entre la pared recta y la tipo UD en el mismo caso de corriente uniforme. Este último hecho no hace más que llamar la atención



Figura 5.24: Comparativa de velocidades de pared para diferentes configuraciones intentando distinguir la contribución de cada término de deformación: (a) Contribución de corriente (b) Contribución geométrica. Curvatura  $a^2 = 3$ .

sobre la pequeña diferencia entre las paredes DU/recta. Si afinamos la vista parece que, sin embargo, la pared DU es finalmente un poco más rápida que la recta. Además habría que tener en cuenta el efecto staircase, que probablemente aumente esta diferencia ligeramente, aunque seguiría siendo realmente pequeña.

#### 5.2.5. Dependencia con los parámetros del material: $\alpha$

Por último, realizamos también un estudio de la dependencia de la dinámica con el parámetro de amortiguamiento del material,  $\alpha$ . Este es un parámetro fenomenológico. Resulta difícil relacionar  $\alpha$  con los mecanismos de amortiguamiento de la precesión de los momentos magnéticos atómicos, por lo

#### 5.2. RESULTADOS FÍSICOS

que debe obtenerse experimentalmente. Nosotros hemos considerado en todas las simulaciones hasta este punto  $\alpha = 0.5$ . Sin embargo, es también habitual encontrar valores de este parámetro desde  $\alpha = 1$  hasta  $\alpha = 0.01$ .

Así, nosotros hemos hecho simulaciones también para diferentes valores de  $\alpha$ , tanto para tiras rectas como curvas. La comparación de las imágenes de la simulación se ve en la figura 5.25. Se ve que para los valores más altos de  $\alpha$  la pared está menos inclinada, en todos los casos, aunque en algunos resulta difícil de observar.



Figura 5.25: Comparativa de varias simulaciones para dos valores diferentes de  $\alpha$ . Anchura w = 64nm. En las tiras curvas  $a^2 = 4/3$ .

Las diferencias en la forma de la pared conforme variamos  $\alpha$  se ven algo mejor si vamos, en el caso de tiras curvas, a curvaturas mayores. En particular, la situación para  $a^2 = 3$  se representa en la figura 5.26. En algunos casos de nuevo las diferencias son difícilmente apreciables. Sin embargo, en el caso de pared tipo DU con un valor de  $\alpha = 0.1$  sí se observa una gran diferencia con el caso "estándar" de  $\alpha = 0.5$ . Se ve cómo la pared ha avanzado a una velocidad mucho mayor por la cara interior, formando una "burbuja" y dejando aislada una pequeña zona del dominio up (blanco en la imagen).Parece entonces que existe un punto crítico por encima del cual la pared se rompe y aparecen nuevos dominios<sup>\*</sup>. Si aumentamos la corriente en este mismo caso (DU CW  $\alpha = 0.1$ ) esta ruptura de la pared es todavía mucho más acusada. Además, el movimiento de las paredes que van apareciendo parece adquirir un régimen turbulento, como se puede ver en los diferentes pasos de la dinámica que aparecen en la figura 5.27. Resulta sin embargo curioso que la situación inicial antes de la escisión se recupera, desplazada, algún tiempo más adelante. Esto se ve en la figura 5.28. Parece entonces que la pared va avanzando con la formación de ondas de spin, recuperando cíclicamente la forma inicial y repitiendo el ciclo. En una situación más realista en la que la cinta no acaba abruptamente, probablemente precedieran en el desplazamiento pequeños dominios de los que se formaron en el régimen turbulento. Estos dominios sin embargo desaparecen en nuestras simulaciones al alcanzar el final de la cinta. Aún así, algunos restos de estos pueden observarse en la imagen 5.28b.

Este punto crítico de ruptura que mencionamos va a depender de la densidad de corriente introducida, del tipo de pared, de la curvatura (lo que es esencialmente una dependencia con la anchura) y de  $\alpha$ ,

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>No se nuclean nuevos dominios, sino que se escinden del que existía al principio.



Figura 5.26: Comparativa de varias simulaciones para diferentes valores diferentes de  $\alpha$ . Anchura w = 64nm. En las tiras curvas  $a^2 = 3$ .



Figura 5.27: Varios pasos de la dinámica para DU CW con  $\alpha = 0,1$ . La corriente introducida es algo mayor que la que se utilizó en las simulaciones de la figura 5.26.



(a) Inicial t=0.4 ns

(b) Final t=1.2 ns

Figura 5.28: Situación inicial y final para la dinámica presentada en 5.27.

como hemos visto. Esto podría ser importante a la hora de diseñar y conocer el límite de operación de un posible dispositivo basado en esta tecnología.

Este podríamos decir que es el primer efecto de la variación de  $\alpha$ . También existe un efecto sobre la velocidad de la pared, que vamos a estudiar en el caso de pequeña curvatura como el de las imágenes en 5.26. Así, el resultado se presenta en la figura 5.29.



Figura 5.29: Comparativa de velocidades de pared para diferentes valores del parámetro de disipación  $\alpha$ : (a)  $\alpha = 0.5$  (b)  $\alpha = 0.05$ . Anchura w = 64nm. En las tiras curvas  $a^2 = 4/3$ .

Se ve cómo la velocidad aumenta drásticamente al aumentar  $\alpha$ . Esto era de esperar, pues  $\alpha$  es el parámetro del material asociado a la disipación. Cuanta más energía se disipe menos puede aprovecharse para desplazar la pared. Vemos también que las diferencias de velocidad parecen conservarse aproximadamente al cambiar  $\alpha$ . Es decir, la dependencia de la velocidad con  $\alpha$  no depende del tipo de pared.

# Capítulo 6

# Estudios futuros

El presente trabajo no pretende ahondar en el estudio de las interacciones que subyacen tras los fenómenos que se han ido discutiendo. Tampoco se han realizado medidas experimentales en laboratorio, habiéndonos limitado a resultados computacionales. Aunque sí existen algunas medidas experimentales que concuerdan, en líneas generales, con los resultados presentados en el trabajo<sup>[28]</sup>. Además, se han considerado ciertas aproximaciones que podrían ser mejor precisadas para conseguir un tratamiento más completo del problema. Así, el objetivo de este trabajo ha sido el de introducir y estudiar algunos de los fenómenos más destacados que aparecen en el estudio de los sistemas descritos en el capítulo 3, de forma que los resultados presentados puedan ser después validados por medidas experimentales o explicados de forma teórica.

Se puede ver entonces que hay muchos frentes todavía donde se puede avanzar en la investigación. Podríamos mencionar, por ejemplo, la inclusión de términos de STT en las simulaciones, considerar paredes tipo Dzyaloshinskii, a medio camino entre paredes tipo Bloch y tipo Néel<sup>[1]</sup>, el estudio de sistemas con más de una capa de material ferromagnético<sup>[27]</sup>, el desarrollo de un modelo unidimensional (1D) para la dinámica de la pared o la inclusión de una temperatura finita no nula en las simulaciones. De particular interés son estas dos últimas cuestiones. Vamos a dedicar únicamente un comentario al modelo 1D y después nos centraremos en los efectos térmicos con un poco más de detalle.

### Modelo unidimensional 1D

La idea del modelo 1D consiste en asumir que el perfil estático de la DW se mantiene durante su desplazamiento. Entonces se puede resolver la dinámica de la DW a partir de la ecuación de LLG utilizando únicamente dos variables<sup>[12, 29]</sup>. Estas dos variables son la posición de la pared y el ángulo que forma la magnetización en la pared con la dirección tangente a la cinta en cada punto, que juega el papel de un momento conjugado.

Este modelo, útil en el caso de tiras rectas, necesita una modificación al pasar a tiras curvas. Así, pasamos de un modelo 1D a un modelo quasi-2D en el que se asume ahora que el perfil de la DW permanece constante en el sistema de referencia móvil propio de la pared<sup>[28]</sup>. Para hacer esto es

necesario transformar el sistema de coordenadas cartesianas del observador al sistema de de referencia de la pared en coordenadas cilíndricas. Debemos añadir entonces una tercera variable a la posición y el ángulo de inclinación de la magnetización que ya teníamos. Esta tercera variable es el ángulo de tilting de la pared, tal como lo hemos definido antes. Esencialmente el ángulo de inclinación de la pared con respecto a la dirección radial.

Los resultados preliminares de este modelo son prometedores, pero necesita aún una comprobación exhaustiva por lo que podría evolucionar o cambiar en el futuro próximo para adaptarse a los nuevos resultados que vayan apareciendo.

### Temperatura: Ecuación de Landau-Lifshitz-Bloch

El reciente interés en las aplicaciones de materiales magnéticos a diferentes dispositivos tecnológicos ha motivado un creciente interés en los efectos de la temperatura sobre estos materiales. Por un lado, podemos ver esto como un resultado debido al creciente éxito y desarrollo de la nanotecnología, donde los sistemas son especialmente susceptibles a excitaciones térmicas. Por otro lado, muchas de las diferentes técnicas que se estudian actualmente para el control de estas nanoestructuras magnéticas las excitaciones térmicas juegan un papel importante, llegando en algunos casos a ser el principal actor en el cambio de magnetización. Así, es vital en el desarrollo futuro del campo la obtención de una teoría que dé cuenta de estas excitaciones térmicas y su efecto sobre la dinámica de la magnetización.

Pero hemos dicho ya que la temperatura supone uno de los límites de aplicación de nuestra teoría micromagnética, ya que puede hacer que fallen las hipótesis que la sustentan. Se buscaron entonces formas de introducir en ella las excitaciones térmicas. Algunos primeros intentos de lograr esto consideraban la reducción de la magnetización de saturación por efecto de la temperatura de acuerdo con una aproximación de campo medio. Otro enfoque para solucionar el problema consistía en añadir un campo fluctuante al campo efectivo de la ecuación de LLG, lo que convierte esta ecuación en una ecuación diferencial estocástica. Pero ambas técnicas de aproximación al problema fallan al intentar describir la dinámica de la magnetización cuando el sistema se acerca a la temperatura de Curie, por no dar cuenta de cambios locales en la magnetización de saturación. Este problema se soluciona con la ecuación de Landau-Lifshitz-Bloch (LLB), que incorpora a la ecuación de LLG no sólo un campo fluctuante, sino también un término que permite que la magnetización cambie su módulo<sup>[3]</sup>.

Para la deducción de la ecuación de LLB partimos de la ecuación de Landau-Lifshitz (LL) ya conocida (ecuación (2.37)). Podemos seguir entonces el enfoque de la dinámica de Langevin. Como ya tenemos un término de disipación en la ecuación de LL, únicamente tenemos que añadir un término de *ruido blanco*<sup>\*</sup> al campo efectivo, con una intensidad dependiente de la temperatura y de la constante de amortiguamiento<sup>[30]</sup>. Sin embargo, esta aproximación sólo resulta válida para bajas temperaturas, ya que no tiene en cuenta la anisotropía de la red cristalina y no permite la variación de la magnetización

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>La condición de ruido blanco consiste en asumir que los valores de una magnitud dada para cualesquiera dos instantes diferentes de tiempo, por próximos que sean, están completamente decorrelacionados<sup>[1]</sup>. Esto se apoya esencialmente en la separación de las escalas de tiempo involucradas: la dinámica de la magnetización se acepta que es mucho más lenta que la dinámica de los procesos microscópicos en el baño térmico que da lugar a las fluctuaciones. Esta hipótesis se puede cuestionar cuando se consideran escalas de tiempo del orden de los picosegundos<sup>[30]</sup>.

de saturación con la temperatura.

Estos problemas desaparecen cuando se considera la aplicación de esta ecuación junto con la dinámica de Langevin a un modelo de espines a escala atómica, en la cual los espines representan momentos magnéticos atómicos estructurados según la red del material. Aunque mantenemos todavía constante el módulo de estos espines atómicos, la magnetización puede cambiar de módulo a través del promediado de las fluctuaciones de espín. Este enfoque resulta tremendamente exitoso, pero limita el estudio a muestras pequeñas, debido a la resolución atómica del modelo. Sin embargo, va a servir como pilar para construir la ecuación de LLB a escala mesoscópica.

La idea que lleva a la ecuación que buscamos, desarrollada por primera vez por Garanin, consiste esencialmente en tres pasos<sup>[30, 31]</sup>. Primero estudia un modelo semi-fenomenológico considerando un único espín clásico aislado interaccionando con un baño térmico, modelizado por campos de Langevin estocásticos en la aproximación de ruido blanco. Después pasa del espín aislado a la magnetización de la muestra apoyándose en consideraciones estadísticas y en la ecuación de Fokker-Planck, que describe la dinámica de la función de distribución de los espines con el tiempo. Por último, utiliza la aproximación de campo medio para estimar las correlaciones espín-espín. Esto le permite utilizar el resultado que teníamos para un único espín ahora para un sistema de muchos espines, aceptando que el campo es el mismo sobre todos ellos y sustituyendo simplemente el campo inicialmente actuando sobre el único espín que considerábamos ahora por el campo medio sobre el conjunto de espines. Cuando pasamos al límite continuo de nuevo y aceptando que el término de intercambio (directo) es el dominante a primer orden, obtenemos finalmente la ecuación de LLB que buscábamos

$$\frac{1}{\gamma}\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\left[\vec{m} \times \vec{H}_{eff}\right] + \alpha_{\parallel}\frac{\left(\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}\right)\vec{m}}{m^2} - \alpha_{\perp}\frac{\left[\vec{m} \times \left[\vec{m} \times \vec{H}_{eff}\right]\right]}{m^2} \tag{6.1}$$

Comparando con la ecuación de Landau-Lifshitz (2.37) vemos que el término que hemos introducido es esencialmente el segundo sumando. Este sumando introduce una variación de la magnetización  $\vec{m}$ colineal a la propia magnetización, dando cuenta del cambio de su módulo. Aparecen entonces dos parámetros de amortiguamiento adimensionales, uno longitudinal ( $\alpha_{\parallel}$ ) y otro transversal ( $\alpha_{\perp}$ ). Estos parámetros se pueden expresar en función de la temperatura T, la temperatura de Curie  $T_C$ , y el parámetro de amortiguamiento  $\lambda$ , que describe el acoplamiento con el baño térmico a nivel atómico<sup>\*</sup>. Las expresiones son entonces, para  $T < T_C$ 

$$\alpha_{\parallel} = 2\lambda \frac{T}{3T_C} \qquad \alpha_{\perp} = \lambda \left[ 1 - \frac{T}{3T_C} \right]$$
(6.2)

Los papeles entre  $\alpha_{\parallel}$  y  $\alpha_{\perp}$  se invierten cuando  $T > T_C$  (vemos que para  $T = T_C$  ambos coinciden, por lo que no hay ningún salto brusco). Así, la ecuación de LLB describe el sistema en el rango completo de temperaturas, con lo que hemos solucionado uno de los problemas principales de nuestra teoría inicial.

Si vamos ahora a los efectos prácticos de la temperatura vamos a destacar dos, aunque realmente

<sup>\*</sup>Se introduce al estudiar el sistema de un único espín.

ambos están relacionados. El primero de ellos tecnológico y el segundo más puramente físico.

El primer efecto al que nos referimos aparece al considerar sistemas de almacenamiento de información como los que se discuten en el siguiente capítulo. En estos sistemas, el tamaño del bit juega un papel importante. Cuanto más pequeño sea este bit, mayores densidades de información podrán alcanzarse. Pero también más inestable será este bit frente a las excitaciones térmicas<sup>[1]</sup>, por lo que podría llegar a perderse información si la temperatura es suficientemente elevada. Así, para que la información sea estable, debe suceder que la barrera de energía que separa los dos posibles estados del bit sea mayor, en valor absoluto, que la energía del baño térmico,  $k_BT$ .

El segundo efecto está relacionado con el pinning del que ya hemos hablado. Recordamos que la rugosidad de las paredes de las cintas magnéticas, bien de origen computacional o debido a inhomogeneidades del material, sirve como puntos de anclaje para las paredes, lo que ralentiza su desplazamiento. El campo térmico sin embargo puede ayudar a sobrepasar este efecto de pinning. Esencialmente lo que sucede es que el campo de *depinning* (desanclaje) puede superarse con campos aplicados menores a los que se necesitarían para temperatura nula, gracias a que, en un momento dado, las fluctuaciones del campo térmico pueden contribuir aumentando el campo aplicado. Estas fluctuaciones pueden entonces enmascarar las irregularidades de la cinta magnética, con lo que se reduce el efecto de pinning por la rugosidad de la cinta. El enmascaramiento será mayor cuanta mayor sea la temperatura, hasta el punto de que estos efectos de inhomogeneidades serán inobservables.
# Capítulo 7

# Aplicaciones

Los sistemas estudiados en este trabajo tienen varias aplicaciones tecnológicas interesantes. Permiten construir por ejemplo osciladores nanométricos sintonizables que podrían servir como emisores de ondas de espín para futuras tecnologías de transmisión de información<sup>[32]</sup>. También puertas y circuitos lógicos basados en nanotiras magnéticas que podrían reemplazar la lógica de CMOS dominante actualmente<sup>[33]</sup>. Pero si hay una aplicación que ha motivado la investigación en el campo esa es la MRAM (Magnetoresistive Random-Access Memory).

La MRAM es un tipo de memoria no volátil que además combina altas velocidades de lectura y escritura y tiene, en teoría, una durabilidad ilimitada. Por todas estas cualidades se dice que podría servir como "memoria universal" en el futuro, mejorando en rendimiento, fiabilidad y costes a los sistemas actuales<sup>[34]</sup>.

En estas MRAM, los dos posibles valores lógicos (0 y 1) de la lógica digital se codifican en las dos posibles orientaciones de la magnetización en una tira magnética como la que hemos estudiado. Tenemos entonces que los bits de esta memoria van a ser dominios magnéticos cuya magnetización tendremos que poder controlar y conocer. Para esto debemos conseguir esencialmente un método de lectura y uno de escritura de información.

Múltiples mecanismos de escritura son posibles. Simplemente la aplicación de un campo magnético externo sobre el dominio en el que se quiere escribir o la aplicación de un torque inducido por corriente de naturaleza similar a los estudiados aquí podría servir para este fin.

La lectura se llevaría a cabo con cabezas lectoras de unión túnel. Estas se basan en el fenómeno de la magnetorresistencia. Estas cabezas estarían formadas por tres capas, una capa magnética libre, una capa de material aislante y una capa de material magnética fija. La magnetización de la capa magnética fija se mantiene fijada, como su propio nombre indica, en una determinada dirección que marca la referencia. La resistencia de los electrones al atravesar las tres capas (por efecto túnel) depende de la orientación relativa de las magnetizaciones de las dos capas magnéticas. El bit de información se codificaría entonces en la capa magnética libre, cuya magnetización (su valor lógico) podemos leer.

Físicamente, estos bits de información se dispondrían en tiras magnéticas de tamaño nanométrico,

bien en una disposición bidimensional o tridimensional, en las llamadas *racetrack memories*. La referencia principal en este campo es el investigador Stuart Parkin, que detalló por primera vez el funcionamiento de estos dispositivos en un artículo en  $2008^{[35]}$ .

El tamaño del bit en estas cintas quedaría fijado mediante la creación de centros de pinning equiespaciados sobre las mismas. Estos centros de pinning pueden crearse haciendo muescas directamente sobre la cinta o variando periódicamente las propiedades del material sobre el que está construida.

Las memorias completas estarían constituidas por una agrupación de bloques elementales constituidos por una cinta magnética, una cabeza de lectura y una cabeza de escritura. Sobre cada una de estas cintas se dispondrían varios dominios (bits) cuyo tamaño determina la densidad de información que se puede conseguir, mayor cuanto más pequeño sea el dominio. La contrapartida de hacer más pequeño el dominio es que este se hace más inestable frente a la temperatura, por lo que se debe buscar un equilibrio entre estabilidad y rendimiento.

Nuestro estudio se centra en el problema de selección del bit que se quiere leer/escribir. Puesto que las cabezas de lectura y escritura se encuentran fijadas en una posición de la cinta, debe desplazarse el bit de interés hasta una posición marcada en la cinta. El control preciso de este desplazamiento resultará clave para el desarrollo de la tecnología en el futuro. Los sistemas y mecanismos estudiados en este trabajo cumplen muchos de los requisitos para esta función, como por ejemplo desplazamiento coherente de las paredes de dominio a alta velocidad y eficiencia en este desplazamiento. Sin embargo, aún no se conocen con profundidad todos los fenómenos involucrados en la dinámica de estos sistemas, por lo que estudios de este tipo, tanto computacionales como experimentales y teóricos son necesarios para el avance del campo.

## Capítulo 8

#### Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado el movimiento de paredes de dominio inducido por corrientes en sistemas multicapa con asimetría de inversión. Desde un enfoque científico, se ha pretendido poner de manifiesto la complejidad de estos sistemas. Esta complejidad surge de la cantidad de efectos físicos que hay que considerar y de las múltiples relaciones que aparecen entre todos ellos. Es por esto que resulta inviable un estudio teórico completo de estos sistemas, existiendo principalmente dos alternativas a este enfoque. Una opción es la elaboración de modelos sencillos que permitan describir el sistema en términos de unas pocas variables. Pero muchas veces son también demasiado complicados o no describen correctamente el sistema de forma completa. La segunda opción son las simulaciones por ordenador que se han empleado en este trabajo. A pesar de los problemas que tienen estas simulaciones que ya se han destacado en la correspondiente sección, esta sigue siendo la principal herramienta de estudio de estos sistemas. Estas simulaciones micromagnéticas permiten un control de las variables involucradas en el problema que resulta muy difícil, si no imposible, de conseguir de forma experimental. Esto permite estudiar de forma precisa y por separado el efecto de cada una de estas variables involucradas en el resultado neto final, lo que a su vez nos permite obtener información valiosa sobre los mecanismos que subvacen, aunque no podamos desarrollarlos analíticamente desde principios más básicos.

La información obtenida sobre estos sistemas podrá ser utilizada además en un futuro próximo para el desarrollo de dispositivos espintrónicos. Esto aporta a la investigación en este tema un valor tecnológico añadido, sobre el valor fundamental que supone conocer la física de estos sistemas complejos.

Desde el punto de vista personal, querría destacar de nuevo la complejidad del tema y su transversalidad, ya que entronca con varias de las asignaturas del grado, desde la física cuántica y del estado sólido, hasta la termodinámica y mecánica teórica pasando por electromagnetismo y electrónica. Sin embargo, me fue necesario empezar por una completa e intensiva revisión bibliográfica del tema para conocer la aplicación concreta de las competencias adquiridas en estas asignaturas del grado. Después pasé a una etapa de aprendizaje en la que tomé contacto con las herramientas, computacionales, en este caso, que se emplearon más adelante en el trabajo. La última etapa consistió en la simulación de los sistemas y el posterior análisis de los datos obtenidos. Puedo decir en este sentido que el presente trabajo ha servido como una buena introducción a lo que supone una investigación científica completa y que este trabajo ha supuesto un gran salto en mi formación, no tanto por los conocimientos adquiridos, sino por las estructuras aprendidas. Puedo decir firmemente que ahora tengo una mayor capacidad para enfocar un problema de forma crítica, buscando soluciones al mismo dentro del método científico. Es mi deseo que este trabajo resulte tan interesante desde el punto de vista científico como lo ha sido desde el personal.

### Referencias

- [1] Luis Sánchez-Tejerina San José. *Magnetic Nanodevices Modelization Focused on Spin-Orbit Coupling Phenomena*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, 2018 (en depósito en la Escuela de Doctorado de la UVa).
- [2] Luis Sánchez-Tejerina San José. Estudio de los Procesos de Manipulación de Estructuras Quirales de la Magnetización Asociadas al Acoplamiento Spin-Órbita. Trabajo Fin de Máster, Universidad de Valladolid, 2015 (en depósito en la UVa).
- [3] http://micromagnetics.org/micromagnetism/. Última consulta: 26 de junio de 2018.
- [4] T. Moriya. New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction. Phys. Rev. Lett. 4, 228, 1960. DOI: 10.1103/PhysRevLett.4.228.
- T. Moriya. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism. *Phys. Rev.* 120, 91, 1960. DOI: 10.1103/PhysRev.120.91.
- [6] I.E. Dzyaloshinskii. A thermodynamic theory of "weak" ferromagnetism of antiferromagnetics. J. Phys. Chem. Solids 4, 241-255, 1958. DOI: 10.1016/0022-3697(58)90076-3.
- [7] A. Aharoni. Introduction to the Theory of Ferromagnetism. Oxford University Press, 2000.
- [8] W.F. Brown Jr. *Micromagnetics*. John Wiley & Sons, 1963.
- [9] W.F. Brown Jr. Magnetostatic Principles in Ferromagnetism. North-Holland Publishing Company, 1962.
- [10] A. Vansteenkiste et al. The design and verification of MuMax3. AIP Advances 4, 107133, 2014. DOI: 10.1063/1.4899186.
- S. Emori et al. Current-driven dynamics of chiral ferromagnetic domain walls. Nat. Mater. 12, 611-616, 2013. DOI: 10.1038/nmat3675.
- [12] E. Martinez et al. Current-driven domain wall motion along high perpendicular anisotropy multilayers: The role of the Rashba field, the spin Hall effect, and the Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Appl. Phys. Lett. 103, 072406, 2013. DOI: 10.1063/1.4818723.
- [13] L. Néel. Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d'orientation. J. Phys. Radium 15, 225-239, 1954. DOI: 10.1051/jphysrad:01954001504022500.

- [14] J.A.C. Bland y B. Heinrich. Ultrathin Magnetic Structures I. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [15] M.T. Johnson et al. Magnetic anisotropy in metallic multilayers. *Rep. Prog. Phys.* 59, 1409-1458, 1996. DOI: 10.1088/0034-4885/59/11/002.
- [16] L. Thomas et al. Racetrack Memory: a high-performance, low-cost, non-volatile memory based on magnetic domain walls. *IEDM*, 2011. DOI: 10.1109/IEDM.2011.6131603.
- [17] P.W. Anderson. Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction. *Phys. Rev.* 79, 350, 1950. DOI: 10.1103/PhysRev.79.350.
- [18] J. Miltat y M. Donahue. Numerical Micromagnetics: Finite Difference Methods. John Wiley & Sons, 2007. DOI: 10.1002/9780470022184.hmm202.
- [19] Michele Voto. Advanced modelling of domain wall dynamics for spintronic devices PhD thesis, Universidad de Salamanca, 2017.
- [20] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. Solid State Physics. Harcourt College Publishers, 1976.
- [21] L.D. Landau y E.M. Lifshitz. Course of Theoretical Physics Vol. VIII: Electrodynamics of Continuous Media. Pergamon Press, 1984.
- [22] O. Boulle et al. Domain Wall Tilting in the Presence of the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in Out-of-Plane Magnetized Magnetic Nanotracks. *Phys. Rev. Lett.* 111, 217203, 2013. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.217203.
- [23] A. Hoffmann. Spin Hall Effects in Metals. *IEEE Trans. Magn.* 49, 5172-5193, 2013. DOI: 10.1109/TMAG.2013.2262947.
- [24] J.C. Slonczewski. Currents and torques in metallic magnetic multilayers. J. Magn. Magn. Mater. 247, 324-338, 2002. DOI: 10.1016/S0304-8853(02)00291-3.
- [25] R. Lehndorf et al. Asymmetric spin-transfer torque in single-crystalline Fe/Ag/Fe nanopillars. *Phys. Rev. B* 76, 214420, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.214420.
- [26] B.D. Cullity y C.D. Graham. Introduction to Magnetic Materials. John Wiley & Sons, 2009.
- [27] S. Yang et al. Domain-wall velocities of up to 750 m s<sup>-1</sup> driven by exchange-coupling torque in synthetic antiferromagnets. *Nat. Nanotechnol.* 10, 221-226, 2015. DOI: 10.1038/nnano.2014.324.
- [28] C. Garg et al. Dramatic influence of curvature of nanowire on chiral domain wall velocity. Sci. Adv. 3, 5, 2017. DOI: 10.1126/sciadv.1602804.
- [29] K-S. Ryu et al. Chiral spin torque at magnetic domain walls. Nat. Nanotechnol. 8, 527-533, 2013. DOI: 10.1038/nnano.2013.102.
- [30] U. Atxitia et al. Fundamentals and applications of the Landau-Lifshitz-Bloch equation. J. Phys. D: Appl. Phys. 50, 033003, 2017. DOI: 10.1088/1361-6463/50/3/033003.
- [31] D.A. Garanin. Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets. *Phys. Rev. B*, 55, 3050-3057, 1997. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.3050.

- [32] M. Voto et al. Pinned domain wall oscillator as a tuneable direct current spin wave emitter. Sci. Rep. 7, 13559, 2017. DOI: 10.1038/s41598-017-13806-1.
- [33] D.A. Allwood et al. Magnetic Domain-Wall Logic. Science 309, 5741, 1688-1692, 2005. DOI: 10.1126/science.1108813.
- [34] J. Akerman. Toward a Universal Memory. Science 308, 5721, 508-510, 2005. DOI: 10.1126/science.1110549.
- [35] S.S.P. Parkin et al. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. *Science* 320, 5873, 190-194, 2008.
  DOI: 10.1126/science.1145799.