



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

**ESTUDIO TEÓRICO-NUMÉRICO DE
MATERIALES ANTIFERROMAGNÉTICOS
NO COLINEALES**

Autor: Víctor Costilla López

Tutores: Luis Sánchez-Tejerina San José, Óscar Alejos Ducal
Año 2025

Índice general

Índice general	I
1. Introducción	2
1.1. Orden Magnético	3
1.2. Micromagnetismo	4
2. Fundamento teórico	6
2.1. Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert	6
2.2. Modelo del campo efectivo	7
2.2.1. Término de intercambio	8
2.2.2. Término de anisotropía	9
2.3. Adaptación del modelo para AFNC	11
2.3.1. Término de intercambio	11
2.3.2. Término de anisotropía	12
3. Metodología y aspectos computacionales	14
3.1. Configuración de las simulaciones	14
3.2. Tratamiento de datos	15
3.3. Modelo de una dimensión. Ansatz de Walker	16
3.3.1. Ajuste no lineal	17
3.3.2. Modelo para la anchura de la pared	17
4. Resultados y discusión	19
4.1. Estados de equilibrio para anisotropía hexagonal	19
4.2. Estudio de las paredes entre dominios	21
4.2.1. Caso con anisotropía homogénea	22
4.2.2. Caso con anisotropía no homogénea	25
4.3. Estudio de la anchura de las paredes	26
4.3.1. Equivalencia entre paredes	27
4.3.2. Dependencia con la constante de anisotropía	31
4.3.3. Dependencia con las constantes de intercambio	32
5. Conclusiones	35
A. Lista de acrónimos	37
Índice de figuras	38
Bibliografía	40

Resumen

Los materiales con orden magnético se han utilizado para desarrollar dispositivos tecnológicos de muy diversos tipos, imanes permanentes, núcleos de transformadores, memorias magnéticas, etc. Pero mayoritariamente con materiales ferromagnéticos. Aunque estos tienen ciertas limitaciones como la velocidad de operación o dificultad de fabricación por requerir algunos de tierras raras. Existen otros tipos de materiales con orden magnético como los antiferromagnéticos o ferrimagnéticos que pueden llegar a sustituir a los ferromagnéticos en algunas situaciones, evitando algunas de sus propiedades indeseadas y aportando otras ventajas. Dentro de los antiferromagnéticos existe un tipo particular llamado no colineal que ha cobrado interés en los últimos años porque presenta una respuesta magnetoresistiva comparable a la de los ferromagnéticos. Este trabajo es un primer estudio numérico de estos materiales esperando arrojar luz sobre sus propiedades fundamentales de cara a su futura aplicación práctica. Se presenta un modelo micromagnético compuesto por tres subredes con la idea de obtener los estados de equilibrio del sistema y las transiciones que aparecen entre estos. Se observan dos tipos de transiciones fundamentales que conforman el resto de texturas magnéticas, entendiendo estas como estados no uniformes del parámetro de orden. Finalmente se demuestra que es posible ajustar estas paredes a una función de prueba que ya ha tenido éxito en estudios similares para materiales ferromagnéticos, y ambos ferrimagnéticos y antiferromagnéticos colineales. Este trabajo constituye un punto de partida para estudios futuros de estos materiales.

Abstract

Materials with magnetic order have been used to develop technological devices of very different types, permanent magnets, transformer cores, magnetic memories, etc. But mostly with ferromagnetic materials. Although these have certain limitations such as speed of operation or difficulty of manufacture because some of them require rare earths. There are other types of materials with magnetic order such as antiferromagnetic or ferrimagnetic materials that can replace ferromagnetic materials in some situations, avoiding some of their undesired properties and providing other advantages. Within the antiferromagnets there is a particular type called non-collinear that has gained interest in recent years because it presents a magnetoresistive response comparable to that of ferromagnets. This work is a first numerical study of these materials hoping to shed light on their fundamental properties with a view to their future practical application. A micromagnetic model composed of three sublattices is presented with the idea of obtaining the equilibrium states of the system and the transitions that appear between them. Two types of fundamental transitions are observed which form the rest of the magnetic textures, understanding these as non-uniform states of the order parameter. Finally, it is shown that it is possible to fit these walls to a test function that has already been successful in similar studies for ferromagnetic materials.

Capítulo 1

Introducción

Desde el descubrimiento de la magnetoresistencia gigante a finales de la década de los 80 [1] se han desarrollado numerosas tecnologías basadas en la espintrónica y magnónica haciendo uso de materiales de tipo Ferromagnético (FM). El descubrimiento del par de transferencia de espín hace 20 años permitió la escritura del estado magnético mediante corrientes eléctricas. Aunque existen dispositivos basados en el Transferencia de Torque de Espín (STT) para su funcionamiento. Su implementación no ha sido tan exitosa como la de los cabezales basados en Magnetoresistencia de efecto Túnel (TMR) por sus limitaciones. Su velocidad de operación es relativamente lenta (del orden de nanosegundos), su eficiencia energética es comparable a dispositivos puramente electrónicos y, habitualmente, requieren del uso de tierras raras para su fabricación. Por estos motivos se están investigando materiales alternativos que sobrepasen las limitaciones mencionadas, como los de tipo Ferrimagnético (FiM) o Antiferromagnético (AFM). Estos últimos, tienen una dinámica de la magnetización más rápida, caracterizada por el factor giromagnético y el campo efectivo. A pesar de tener un factor giromagnético similar a FM ($\gamma \approx 28 \text{ GHz/T}$) tienen un campo magnético efectivo dominado por la interacción de intercambio (del orden de unos pocos T a decenas de T), mientras que en los FM está dominado por la anisotropía (de decenas de mT a cientos de mT).

Por lo tanto, es de gran interés entender el funcionamiento de los materiales AFM tanto desde el punto de vista fundamental como el aplicado. Dentro de estos existen los de tipo Antiferromagnético No Colineal (AFNC). El modelo más sencillo de material AFM es el descrito por dos subredes equivalentes fuertemente acopladas a través de la interacción de intercambio. No obstante, existen sistemas con más de dos subredes de forma que la orientación de las subredes no es colineal. Se dice que se alcanza una situación de frustración de spin al no poder minimizarse la energía de intercambio de una subred con otra, correspondiendo el estado de equilibrio a una situación de compromiso entre el intercambio de una subred con otra y de la primera con la tercera. Aunque estas situaciones han sido descritas mediante modelos de dos subredes, estos presentan dificultades a la hora de describir toda la física asociada a los grados de libertad que se ignoran al simplificar la descripción. En particular, estos sistemas presentan, a diferencia de los AFM colineales, un momento octopolar magnético que parece ser imprescindible para explicar la fenomenología asociada [2, 3] y, en particular, la respuesta magnetoeléctrica, de gran interés tecnológico. Este orden magnético más exótico tiene propiedades inesperadas como un efecto piezomagnético gigante [4] o un efecto Hall de espín anómalo. Es a esta clase de materiales a los que llamaremos materiales antiferromagnéticos no colineales (AFNC).

El objetivo de este trabajo es estudiar este último tipo de material adaptando la teoría desarrollada para AFM y resolviendo numéricamente el modelo obtenido. Para resolverlo se va a

utilizar el código desarrollado durante mis prácticas de empresa en la Universidad de Valladolid. Dado que es el primer estudio del grupo usando el código desarrollado nos centraremos primero en la obtención de los estados de equilibrio que se alcanzan, los cuales deberán corresponder a los estados de frustración de espín comentados anteriormente, estado las subredes orientadas en direcciones que forman ángulos de 120° unas con otras, tal y como se describe en la sección 4.1. Una vez conocidos los estados de equilibrio podemos pasar al estudio de muestras con parámetro de orden (el vector análogo a la magnetización en materiales FM) no uniforme. Estos estados, que llamaremos de forma genérica como texturas “magnéticas” por analogía al caso FM se prevé que sean muy diversos. En el caso de materiales FM se distinguen vórtices, skyrmions, skyrmioniums, merons entre otros. En muchos de estos casos no está claro cómo habría que generalizar esas texturas al caso de materiales AFNC. En cualquier caso, nosotros nos centraremos en el estudio de las texturas más sencillas, las paredes de dominio o DW, que describen la transición del parámetro de orden desde una región en la que este parámetro es uniforme a otra donde también lo es, pero está orientado en otra dirección. Este estudio está organizado en dos secciones, 4.2 y 4.3, con sus correspondientes subsecciones.

Antes de ello, y para poder ser capaces de interpretar y entender los resultados obtenidos necesitaremos introducir el fundamento teórico en el que se basan las simulaciones (Capítulo 2) así como las herramientas computacionales utilizadas para llevar a cabo las simulaciones numéricas y el tratamiento de los resultados (Capítulo 3). Finalizaremos el presente trabajo con las conclusiones extraídas del mismo en el Capítulo 5.

1.1. Orden Magnético

En primer lugar demos unas definiciones sobre materiales magnéticos. Con este término suele referirse a materiales en los que aparece un ordenamiento magnético espontáneo [5]. Este orden surge por el alineamiento de espines electrónicos de los átomos del material, y su estabilidad se explica con la interacción de intercambio para esos electrones. El orden que surge puede ser alterado aplicando campos magnéticos o elevando suficientemente la temperatura, haciendo que la agitación térmica entre otros estímulos lo rompa. En nuestro estudio no vamos a considerar transiciones de fase, teniendo siempre un orden AFNC y, de hecho, consideraremos que estamos suficientemente lejos de cualquier temperatura crítica pudiendo asumir que la temperatura no influye en el comportamiento del material.

La clasificación más sencilla para los tipos de orden magnético consiste en agruparlos en FM, FiM y AFM. El primer tipo se caracteriza por tener una única subred, es decir, se caracteriza porque todos los dipolos del material en “distancias cortas” (concretaremos más adelante que entendemos por “corta” en este contexto) están alineados en la misma dirección, porque la interacción de intercambio favorece el alineamiento paralelo de los espines. Los FiM también poseen una magnetización permanente pero es de menor magnitud que en los FM. No obstante, una diferencia fundamental es que en este caso podemos distinguir dos subredes. Para cada subred, los dipolos que la conforman están orientados en la misma dirección, pero las orientaciones de las subredes difieren, reduciendo de forma significativa la magnetización en los dominios del material. Por último, los AFM carecen de magnetización permanente, y al igual que en los FiM, podemos describir el material mediante dos (o más) subredes, pero con la diferencia de que en este caso estas subredes son equivalentes y la compensación del momento magnético y el momento angular es completa, careciendo de magnetización espontánea y densidad de momento angular neta. El aspecto que queremos destacar es que en el caso de los FM se describen como una única red de magnetizaciones a lo largo del material, mientras que los casos FiM y AFM de manera análoga, se necesita recurrir a al menos dos redes de

magnetizaciones, tal y como se ve en la [Figura 1.1](#). Por lo tanto, en el caso AFM aunque la magnetización neta se anula, existe orden magnético en el material. Lo mismo sucede para FiM pero los módulos de cada subred son distintos, por lo que no se anulan completamente.

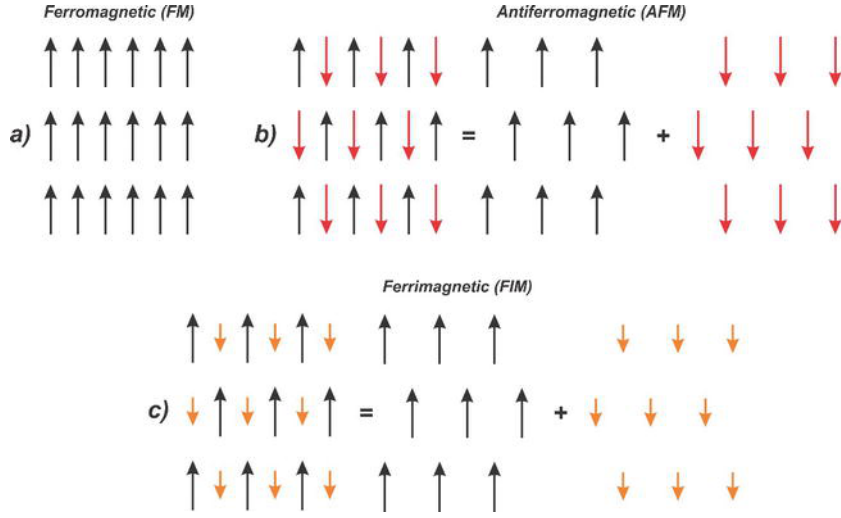


Figura 1.1: Esquema de las subredes para los casos FM, AFM y FiM. Extraído de [6].

En este trabajo nos enfocaremos en materiales AFM no colineales, AFNC. También están compuestos por redes de magnetizaciones que se anulan entre sí, pero estas pueden tener cualquier orientación en el espacio tridimensional y puede haber más de dos. El caso más sencillo y el único que se contempla en el trabajo, considera tres subredes. Como veremos, la interacción entre las distintas subredes llevará a que las tres subredes se orienten en un único plano. Dado que la interacción de intercambio es isotrópica, la preferencia del plano en el que sitúen vendrá determinada por la anisotropía del material, como describiremos más adelante.

1.2. Micromagnetismo

La interacción de intercambio sucede a escalas atómicas (< 1 nm) pero como se pretende simular muestras micrométricas no es viable realizar las cuentas a nivel atómico. No obstante esta no es la única aproximación para estudiar materiales magnéticos, existiendo también una descripción micromagnética, una teoría de dominios y una teoría de fases [7]. Dado que pretendemos estudiar muestras de tamaño micrométrico, plantearemos el estudio desde el punto de vista micromagnético, el cual nos dará suficiente detalle de las regiones de transición entre dominios (y otras texturas magnéticas) a un costo computacional asumible con las Graphical Processing Unit (GPU) de las que disponemos. Para ello, modificaremos las expresiones teóricas de la interacción de intercambio para considerarlas en un volumen en el rango micromagnético.

Los materiales que se comportan como AFNC van a conformar una red característica, formando planos en los que los átomos se distribuyen siguiendo una estructura hexagonal (ver [Figura 1.2](#)). Esta estructura se conoce como red de Kagome [8]. Los espines electrónicos de cada átomo van a interactuar entre sí mediante la interacción de intercambio, dando lugar a una dinámica acoplada entre las subredes. La interacción de intercambio es de corto alcance, por lo que en el caso FM suele ser suficiente considerar la aproximación a primeros vecinos. No obstante, en el caso FiM es necesario considerar también la interacción a segundos vecinos para dar cuenta de la fenomenología de algunos materiales. En el caso AFNC también incluiremos la interacción a segundos vecinos, de forma que podemos distinguir la interacción

de intercambio con átomos de otra subred y con átomos de la misma subred. Se darán los detalles en el capítulo 2. De esta forma podemos justificar el comportamiento AFNC de manera microscópica, pero posteriormente adaptaremos estas ideas para lidiar únicamente en la escala micromagnética.

Por último, el hecho de que el material esté compuesto por esta red tendrá consecuencias en la anisotropía magnetocristalina. En nuestro caso, y dado que tenemos tres subredes equivalentes, tendremos, en el plano común de las tres subredes, una simetría de orden 6. Si queremos distinguir direcciones privilegiadas dentro de ese plano, deberemos considerar un término de anisotropía acorde a dicha simetría, es decir, una simetría hexagonal, como detallaremos en el capítulo 3.

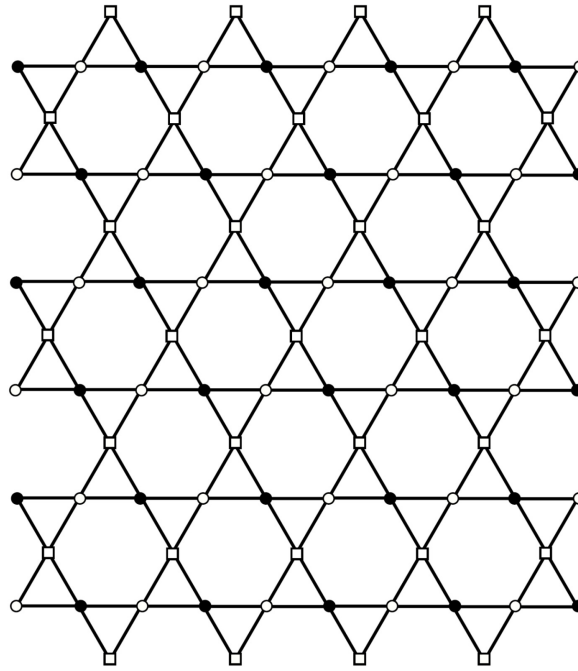


Figura 1.2: Red cristalina de tipo Kagome formada por tres tipos de subredes, representadas por los átomos circulares rellenos, circulares vacíos y cuadrados vacíos. Extraído de [9]

Capítulo 2

Fundamento teórico

En primer lugar se va a estudiar el modelo ferromagnético por sencillez y porque nos permite introducir conceptos útiles también para materiales antiferromagnéticos. Después de desarrollar las expresiones convenientes para dicho modelo, descritos mediante una única subred magnética, se pasará a generalizar la teoría para describir sistemas con varias subredes fuertemente acopladas, en particular tres subredes equivalentes, es decir, antiferromagnéticos no colineales.

2.1. Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert

Para poder describir también analíticamente, no sólo numéricamente, un sistema ferromagnético (y posteriormente uno antiferromagnético no colineal) es necesaria una ecuación que rijan la dinámica. Para obtenerla, se parte del torque generado al aplicar un campo magnético externo $\vec{H}$ sobre un momento magnético $\vec{\mu}$ [10],

$$\vec{\tau} = \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H}, \quad (2.1)$$

y por las leyes de la dinámica, se puede asociar a dicho torque la variación del momento angular

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\tau}, \quad (2.2)$$

donde $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ es el momento angular total del electrón, que es posible relacionar con $\vec{\mu}$ a través de

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e} g \vec{J}, \quad (2.3)$$

siendo $g = 1 + \frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$ el factor de Landé, que dependerá del material. No se entrará en detalle sobre el valor exacto pero será cercano al del electrón, 2, en la mayoría de casos. Si ahora se define la constante

$$\gamma = \frac{|e|}{2m_e} g \quad \text{con } e < 0 \quad (2.4)$$

se llega a una ecuación diferencial para $\vec{\mu}$

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma_0 \vec{\mu} \times \vec{H}. \quad (2.5)$$

Podemos reescribir la ecuación en términos de la magnetización $\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}}{dV}$ y sustituir el campo externo por un campo efectivo que tenga en cuenta las interacciones dentro del material a esa escala al que llamaremos de momento, $\vec{H}_{eff}$, dando su definición mas adelante

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}. \quad (2.6)$$

Se ha asumido que el vector magnetización $\vec{M}$ tiene módulo constante $|\vec{M}| \equiv M_s$ lo que nos permite trabajar con la magnetización reducida $\vec{m}$ normalizando a la magnetización de saturación.

$$\vec{m} = \frac{1}{M_s} \vec{M}. \quad (2.7)$$

Con esta definición se tiene la condición $|\vec{m}| = 1$, lo que implica que cualquier variación en la magnetización ha de ser perpendicular a esta

$$\frac{\partial \vec{m}^2}{\partial t} = 2 \left(m_i \frac{\partial m_i}{\partial t} \right) = 2 \left(\vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \right) = 0. \quad (2.8)$$

Por lo tanto, si se quiere introducir un término disipativo tiene que ser perpendicular a $\vec{M}$. Una propuesta es añadir al campo efectivo $-\frac{\alpha}{\gamma_0} \frac{\partial \vec{m}}{\partial t}$, donde α es una constante de amortiguamiento adimensional

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma_0 \vec{M} \times \left(\vec{H}_{eff} - \frac{\alpha}{\gamma_0} \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \right) = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right), \quad (2.9)$$

que se conoce como la ecuación de Gilbert. En (2.9) el primer sumando imprime una precesión alrededor de $\vec{H}_{eff}$, que por tanto no alineará la magnetización con el campo. Sin embargo, el segundo término, siendo perpendicular a $\vec{M}$ y a su derivada, permite dar cuenta de la orientación de la magnetización en la dirección del campo. Por ello, tendrá una componente que alinea la magnetización hacia el campo y otra componente que ralentiza la precesión en torno a $\vec{H}_{eff}$.

Multiplicando (2.9) vectorialmente por la derecha por $\vec{M}$ y haciendo uso de la relación $\vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) = -M_s^2 \frac{\partial \vec{M}}{\partial t}$ se desacopla el efecto de la precesión y alineamiento, obteniendo

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\frac{\gamma_0}{1 + \alpha^2} \vec{m} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1 + \alpha^2} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}). \quad (2.10)$$

Conocida como la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), que es la que se resuelve numéricamente, por sencillez.

2.2. Modelo del campo efectivo

Podemos describir el sistema mediante una densidad lagrangiana $\mathcal{L}$. Siendo la magnetización un campo vectorial continuo esta dependerá tanto de la propia magnetización como de sus derivadas temporales y espaciales, además de la posición y el tiempo [11]. Aplicando el método variacional sobre esta densidad $\mathcal{L}(\vec{m}, \dot{\vec{m}}, \vec{\nabla} \vec{m}, \vec{r}, t)$ genérica e imponiendo $|\vec{m}| = 1$ [12], se llega a la expresión

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta g_V}{\delta \vec{m}} \quad (2.11)$$

donde g_V es la densidad de energía libre y el operador δ es la derivada funcional

$$\frac{\delta}{\delta \vec{m}} \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{m}} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})} \quad (2.12)$$

siendo $\vec{\nabla} \vec{m} = \frac{\partial m_i}{\partial r_j}$ un tensor de rango 2. Debido al carácter aditivo de la densidad de energía, es posible descomponerla en una serie de sumandos que modelen cada interacción y después calcular la derivada funcional de cada interacción por separado y sumar los campos obtenidos. En nuestro estudio se han considerado los términos de intercambio y anisotropía magnética ¹.

2.2.1. Término de intercambio

La primera teoría moderna del ferromagnetismo, propuesta por Pierre Weiss, estaba basada en el paramagnetismo de Langevin que después se generalizó en la teoría de Brillouin. Su idea fue introducir un campo molecular proporcional a la magnetización $\vec{H}_W = \lambda \vec{M}$. Las expresiones obtenidas prevén imanación espontánea, que decrece hasta anularse a cierta temperatura T_C . Para temperaturas mayores se comporta como un paramagnético, siguiendo la ley de Curie-Weiss [13]. Aunque el acuerdo experimental es bueno, la teoría es incapaz de explicar el origen de dicho campo molecular. En el caso del hierro, el campo molecular es $B_W = \mu_0 H_W \approx 10^3$ T, cantidad inexplicable por la débil interacción dipolo-dipolo magnética. La energía de dicha interacción calculada para momentos dipolares $|\vec{m}_1| = |\vec{m}_2| = \mu_B$ y una distancia de 1 Å es del orden de $W_{dip} \sim 10^{-23}$ J.

No fue hasta el desarrollo de la mecánica cuántica que se pudo explicar, a través de la interacción de intercambio. Este campo molecular surge de considerar la repulsión coulombiana de dos electrones cercanos e imponer el principio de exclusión de Pauli. Como son fermiones idénticos, la función de onda total ha de ser antisimétrica, lo que se puede conseguir con su parte orbital simétrica (antisimétrica) y parte de espín antisimétrica (simétrica). La energía es distinta para cada caso debido a la repulsión coulombiana ². De esta forma, la tendencia del sistema a preferir una configuración espacial u otra afecta al espín total. Como se acoplan $s_1 = s_2 = 1/2$, tendremos un estado propio a $S = 0$ (espines antiparalelos, singlete) y otros tres a $S = 1$ (espines paralelos, triplete). Para generalizar este fenómeno a sistemas multielectrónicos se introduce el Hamiltoniano de Heisenberg

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j. \quad (2.13)$$

Donde J_{ij} es la integral de intercambio definida como la diferencia entre las energías entre ambas configuraciones ($\uparrow\uparrow - \uparrow\downarrow$) del subsistema formado por los i,j -ésimos electrones. Si $J_{ij} > 0$ el material es ferromagnético, favoreciendo el alineamiento paralelo de los espines, mientras que $J_{ij} < 0$ indica que es antiferromagnético. Además, solo se suma a primeros vecinos ya que el valor de J_{ij} decrece rápidamente con la distancia. $\hat{S}_k$ denota operador de espín. Interesa adaptar la expresión al continuo para poder deducir una densidad de energía. Se sustituyen operadores por vectores clásicos $\hat{S}_k \rightarrow S \vec{s}_k$. También se asume que la integral de intercambio toma el mismo valor para todos los primeros vecinos $J_{ij} = J$. Con estas modificaciones se obtiene

$$\mathcal{U}_{exch} = -JS^2 \sum_{i,j} \cos \phi_{ij}, \quad (2.14)$$

¹Existe también el término de desmagnetización, pero requiere magnetización neta y los materiales antiferromagnéticos carecen de esta.

²También existen interacciones entre los espines pero son despreciables en comparación

siendo ϕ_{ij} el ángulo entre $\vec{s}_i$ y $\vec{s}_j$. Se insiste en que la interacción de intercambio es la más importante a distancias cortas, por lo que en distancias cortas los espines estarán muy próximos a la configuración de equilibrio $\uparrow\uparrow$. Entonces ϕ_{ij} será pequeño y es justificable desarrollarlo en serie. Ignorando los términos de cuarto o mayor orden y redefiniendo el origen de energías

$$\mathcal{U}_{exch} = JS^2 \sum_{i,j} \phi_{ij}^2. \quad (2.15)$$

Como los vectores unitarios $\vec{s}_i$ son paralelos a $\vec{\mu}_i$, el ángulo ϕ_{ij} también es el que forman los vectores $\vec{m}_i$. Con la aproximación considerada, el ángulo se puede escribir como $\phi_{ij} \approx |\vec{m}_i - \vec{m}_j| \approx \left| \left(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{m} \right|$ donde $\vec{r}_{ij}$ es el vector posición del punto i respecto del j . Por último, la suma se convierte en integral [14]

$$\mathcal{U}_{exch} = \int_V A \left(\vec{\nabla} \vec{m} \right)^2 dV. \quad (2.16)$$

O en forma de densidad de energía

$$u_{exch} = A \left(\vec{\nabla} \vec{m} \right)^2, \quad (2.17)$$

donde $\left(\vec{\nabla} \vec{m} \right)^2 \equiv \left(\vec{\nabla} m_x \right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_y \right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_z \right)^2$ en coordenadas cartesianas. La constante A J/m es un parámetro que depende del material y se denomina constante de intercambio. Se puede relacionar con J y S dependiendo de la red. En nuestro estudio solo la tomaremos como un parámetro a ajustar. Con esta expresión se obtiene el campo efectivo asociado usando (2.12)

$$\vec{H}_{exch} = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \vec{m} \right). \quad (2.18)$$

2.2.2. Término de anisotropía

El término de intercambio es invariante bajo rotaciones ya que solo depende de la orientación relativa de los espines. Pero los experimentos muestran ejes fáciles y difíciles en materiales magnéticos, direcciones donde alinear la magnetización es energéticamente más o menos favorable, respectivamente. Esta anisotropía se debe a interacciones relativistas entre sus átomos. Para desarrollar una teoría macroscópica es necesario deducir una energía de anisotropía. Es posible obtenerla mediante teoría cuántica de perturbaciones, pero si buscamos la forma general de las expresiones no será necesario [15]. Para ello, se utilizarán consideraciones de simetría.

En el caso de anisotropía uniaxial se obtienen resultados válidos si se toma la energía como serie de potencias en $\vec{m}$. La expresión solo puede contener potencias pares ya que la energía es invariante bajo inversión temporal pero la magnetización no. Una expresión que cumple estas condiciones es

$$u_{uniax} = K_0 - K_1(\vec{m} \cdot \vec{u}_k)^2 - K_2(\vec{m} \cdot \vec{u}_k)^4 - K_3(\vec{m} \cdot \vec{u}_k)^6 + \dots \quad (2.19)$$

Si despreciamos términos de cuarto orden y superior

$$u_{uniax} = K_0 - K_1(\vec{m} \cdot \vec{u}_k)^2, \quad (2.20)$$

donde K_0 y K_1 (J/m^3) son coeficientes a determinar y $\vec{u}_k$ es un vector unitario paralelo al eje de anisotropía. Si $K_1 > 0$ dicho eje se considera fácil y es energéticamente favorable, mientras

que si $K_1 < 0$ es un eje duro y la magnetización permanecerá en un plano perpendicular a esa dirección. Aplicando la derivada funcional (2.12) se obtiene el campo de anisotropía uniáxica

$$\vec{H}_{uniax} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\vec{m} \cdot \vec{u}_k) \vec{u}_k. \quad (2.21)$$

Ambas definiciones se pueden expresar en términos de θ , que se define como el ángulo de la magnetización respecto a un eje (que será el difícil), que tomaremos como eje z .

$$u_{uniax} = K'_0 + K_1 \sin^2 \theta, \quad (2.22)$$

$$\vec{H}_{uniax} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\cos \theta) \vec{u}_k. \quad (2.23)$$

Aunque es conveniente trabajar con las definiciones de energía en función de $\vec{m}$ para aplicar la derivada funcional, utilizar las expresiones en θ ayudan a la interpretación espacial.

En este trabajo hemos considerado un material AFNC que conforman una red de kagome con simetría hexagonal, como se puede ver en la Figura 1.2. En primera aproximación, esta simetría se asemeja a una uniáxica, con un eje fácil o difícil. Términos superiores del desarrollo en serie, no obstante, nos darán una dependencia de la energía con la dirección de la magnetización en el plano basal. Escogiendo una combinación invariante de ese orden [15], se propone la siguiente energía

$$u_{hex} = u_{uniax} - 6K_{3b} \left(m_x^5 m_y - \frac{10}{3} m_x^3 m_y^3 + m_x m_y^5 \right), \quad (2.24)$$

donde la constante K_{3b} (J/m³) es un coeficiente a determinar, como las K_i introducidas anteriormente. El subíndice $3b$ es para indicar que es de sexto orden y distinguirlo con respecto al término del mismo orden en el desarrollo uniáxico (2.19). El campo efectivo asociado se calcula con la derivada funcional (2.12)

$$\begin{aligned} \vec{H}_{hex} = \vec{H}_{uniax} + \frac{6K_{3b}}{\mu_0 M_s} & \left(5m_x m_y (m_x^3 \vec{u}_x + m_y^3 \vec{u}_y) - 10m_x^2 m_y^2 (m_x \vec{u}_x + m_y \vec{u}_y) \right. \\ & \left. + m_y^5 \vec{u}_x + m_x^5 \vec{u}_y \right). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Y expresados en función de θ y ϕ , que se define como el ángulo entre la magnetización $\vec{m}$ y el vector unitario $\vec{u}_x$

$$u_{hex} = u_{uniax} - K_{3b} \sin^6 \theta \sin(6\phi), \quad (2.26)$$

$$\vec{H}_{hex} = \vec{H}_{uniax} + \frac{6K_{3b}}{\mu_0 M_s} \sin^5 \theta (\sin(5\phi) \vec{u}_x + \cos(5\phi) \vec{u}_y). \quad (2.27)$$

En resumen, la energía de anisotropía magnética que se va a considerar es la suma de la contribución uniáxica y hexagonal

$$u_{anis} = K'_0 - K_1 \sin^2 \theta + K_{3b} \sin^6 \theta \sin(6\phi). \quad (2.28)$$

Dando valores a las constantes se pueden representar superficies de energía que nos ayuden a identificar los estados fáciles. Como se puede ver en la Figura 2.1, los valores positivos de K_1 crean lóbulos en el eje z , dando lugar a zonas energéticamente favorables para la magnetización. Si por el contrario K_1 es negativo, la superficie se extiende sobre el plano xy . En cuanto a la anisotropía hexagonal, divide el plano en 12 direcciones que corresponden a los extremos relativos de la función $\sin(6\phi)$. Estos cortes pueden máximos (estado desfavorable) o mínimos (estado favorable). En las superficies se manifiesta como lóbulos situados en las direcciones privilegiadas según el signo de K_{3b} . El efecto de la anisotropía hexagonal se puede apreciar en las figuras 2.1a y 2.1b, pero queda enmascarado por la contribución uniáxica.

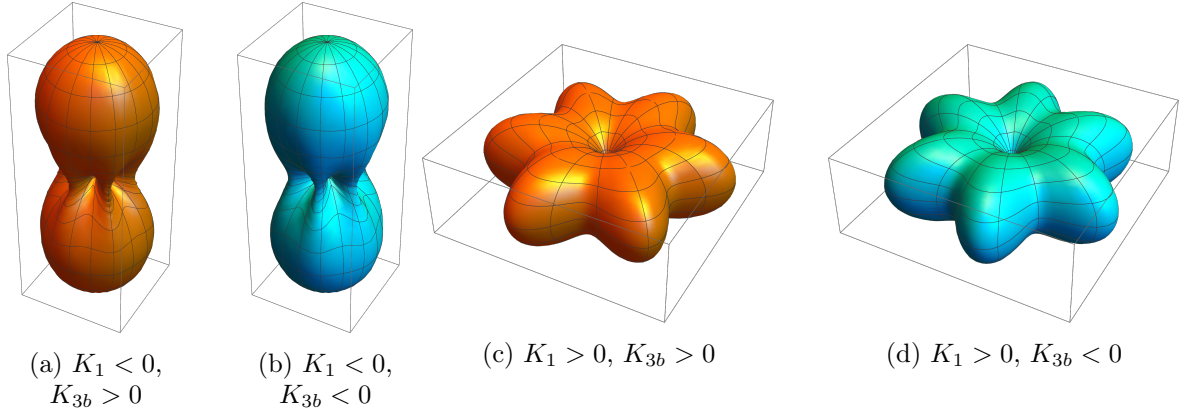


Figura 2.1: Superficies de energía para distintos signos de las constantes de anisotropía. Las unidades son arbitrarias y la proporción para las constantes es $K_{3b}/K_1 = 0,2$.

2.3. Adaptación del modelo para AFNC

Para un material AFNC consideramos el sistema como tres subredes magnéticas equivalentes [16]. Se definen las tres magnitudes $\vec{m}_1$, $\vec{m}_2$ y $\vec{m}_3$ como las magnetizaciones de cada subred, todas ellas con $M_{s,1} = M_{s,2} = M_{s,3} = M_s$. La ecuación LLG (2.10) dictará la dinámica de cada magnetización por separado. El acople entre las subredes se introduce en el cálculo de los campos efectivos. Por lo tanto, se tiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales a resolver

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \vec{m}_1}{\partial t} &= -\frac{\gamma_0}{1+\alpha^2} \vec{m}_1 \times \vec{H}_{eff,1} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1+\alpha^2} \vec{m}_1 \times (\vec{m}_1 \times \vec{H}_{eff,1}), \\
 \frac{\partial \vec{m}_2}{\partial t} &= -\frac{\gamma_0}{1+\alpha^2} \vec{m}_2 \times \vec{H}_{eff,2} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1+\alpha^2} \vec{m}_2 \times (\vec{m}_2 \times \vec{H}_{eff,2}), \\
 \frac{\partial \vec{m}_3}{\partial t} &= -\frac{\gamma_0}{1+\alpha^2} \vec{m}_3 \times \vec{H}_{eff,3} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1+\alpha^2} \vec{m}_3 \times (\vec{m}_3 \times \vec{H}_{eff,3}),
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

donde $\vec{H}_{eff,i}$ es función de $\vec{m}_j$, $\vec{\nabla} \vec{m}_j$ de las otras subredes, quedando así las subredes acopladas. Al igual que en la sección anterior, se tendrán en cuenta los términos de intercambio y anisotropía únicamente.

La definición del campo efectivo se refiere a cada una de las subredes

$$\vec{H}_{eff,i} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta u_V}{\delta \vec{m}_i}, \tag{2.30}$$

donde en la derivada funcional se efectúan las derivadas únicamente con respecto de la magnetización de la subred i .

2.3.1. Término de intercambio

El origen físico de la interacción de intercambio es menos evidente para el caso AFNC. Hay que recordar que el material presenta una red de Kagome, y en cada celda se tienen tres subredes con sus respectivas magnetizaciones. A diferencia del caso ferromagnético, cada subred podrá interactuar con otros dos dentro de su misma celda a mayores de los pertenecientes a celdas vecinas. Si estas interacciones se tratan de manera análoga se obtienen las mismas expresiones para la energía de intercambio, salvo una excepción. Antes asociamos a J la constante A , pero como su valor depende de la distancia, será necesario definir nuevas constantes. Estas son:

- Intralattice, A_{ii} : regulan las interacciones entre magnetizaciones de la misma subred. Como las subredes son equivalentes $A_{11} = A_{22} = A_{33}$.
- Interlattice: moderan las interacciones entre la magnetizaciones de subredes distintas.
 - Misma celda B_{ij} : se asume $B_{ii} \rightarrow \infty$, lo que garantiza que la magnetización de la subred es igual a la magnetización cuando la temperatura tiende a 0. Esta aproximación es válida para temperaturas suficientemente por debajo de la temperatura crítica. Las subredes son equivalentes $B_{12} = B_{13} = B_{23}$.
 - Distinta celda A_{ij} : son simétricas, $A_{ij} = A_{ji}$. Por ser las subredes equivalentes $A_{12} = A_{13} = A_{23}$.

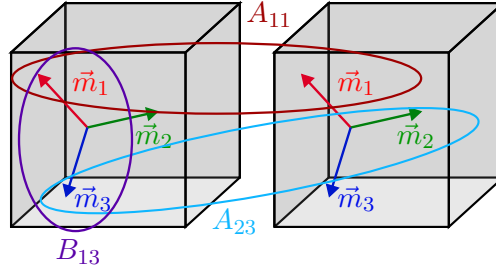


Figura 2.2: Esquema de las constantes de intercambio. La constante A_{11} conecta las magnetizaciones de la primera subred entre celdas vecinas, A_{23} conecta las magnetizaciones de las subredes 2 y 3 entre celdas vecinas. Y la constante B_{13} conecta las magnetizaciones de la primera y tercera subred dentro de la misma celda computacional.

Con estas definiciones, se propone la siguiente expresión para la densidad de energía de intercambio [17]

$$u_{exch} = A_{ii} \left\| \vec{\nabla} \vec{m}_i \right\|^2 + A_{ij} \left\| \langle \vec{\nabla} \vec{m}_i, \vec{\nabla} \vec{m}_j \rangle \right\| + B_{ij} \vec{m}_i \vec{m}_j \quad (i \neq j), \quad (2.31)$$

donde se ha utilizado el convenio de sumación de Einstein y el producto $\left\| \langle \vec{\nabla} \vec{m}_i, \vec{\nabla} \vec{m}_j \rangle \right\| = (\partial_x m_{x,i})(\partial_x m_{x,j}) + (\partial_y m_{y,i})(\partial_y m_{y,j}) + (\partial_z m_{z,i})(\partial_z m_{z,j})$. Los campos efectivos se obtienen con la definición (2.30)

$$\vec{H}_{exch,i} = \frac{B_{ij}}{M_s} \vec{m}_j - \frac{2A_{ii}}{M_s} \nabla^2 \vec{m}_i - \frac{A_{ij}}{M_s} \nabla^2 \vec{m}_j \quad (i \neq j), \quad (2.32)$$

o de manera más compacta

$$\vec{H}_{exch,i} = \frac{B_{ij}}{M_s} \vec{m}_j - \frac{A_{ij}}{M_s} (\delta_{ij} + 1) \nabla^2 \vec{m}_j. \quad (2.33)$$

Los índices i, j toman los valores 1,2,3 e indican la subred considerada.

2.3.2. Término de anisotropía

Se supone que las subredes magnéticas son equivalentes, por lo tanto, responderán de la misma manera a la anisotropía magnetocristalina. Para reflejar este hecho, los campos efectivos de anisotropía para cada magnetización se definen igual

$$u_{anis,i} = K_0 + K_1 (\sin \theta_i)^2 - K_{3b} \sin^6 \theta_i \sin(6\phi_i), \quad (2.34)$$

donde i denota la subred y los ángulos θ_i y ϕ_i son aquellos entre la magnetización $\vec{m}_i$ y las direcciones $\vec{u}_z$ y $\vec{u}_x$ respectivamente. Lo que lleva a los siguientes campos efectivos

$$\vec{H}_{anis,i} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\sin \theta_i) \vec{u}_z + \frac{6K_{3b}}{\mu_0 M_s} \sin^5 \theta_i (\sin(5\phi_i) \vec{u}_x + \cos(5\phi_i) \vec{u}_y). \quad (2.35)$$

Capítulo 3

Metodología y aspectos computacionales

Se tienen tres redes de magnetizaciones fuertemente acopladas a través de la interacción de intercambio y su dinámica regida por la ecuación LLG (2.10). Esta ecuación es no lineal al depender el campo efectivo que actúa sobre la magnetización de la propia magnetización, lo que obliga a tratar el problema con métodos numéricos.

3.1. Configuración de las simulaciones

El marco de trabajo para este estudio ha sido mumax³, un programa que simula sistemas micromagnéticos en tarjetas gráficas, también conocidas como GPU [18]. La versión base solo considera el caso ferromagnético, para poder estudiar AFNC se ha tenido que modificar el código para incluir nuevas subredes e interacciones. Los detalles técnicos se pueden consultar en las respectivas documentaciones de mumax³ y la versión adaptada a nuestro caso de estudio [19].

Las simulaciones usan el método de diferencias finitas en una red tridimensional con celdas romboédricas. Para cada una de ellas se pueden ajustar sus parámetros materiales, como las constantes K_{3b} o A_{ij} , de esta forma dando lugar a regiones que equivaldrían a materiales distintos o granos con propiedades distintas. Las magnetizaciones se calculan en el centro de cada celda, lo que significa que cualquier $\vec{m}_i$ en una celda dada está a la misma distancia de cualquier otra $\vec{m}_j$ de una celda vecina. Aunque si se estudia la estructura cristalina, las magnetizaciones no se encuentran en el centro de la celda. Cada celda computacional da un promedio de la subred y su efecto en las vecinas, obviando detalles microscópicos en favor del estudio de estructuras de mayor tamaño. Como el material considerado es antiferromagnético, el acoplo entre subredes debe favorecer alinear los espines de manera antiparalela. Por lo tanto $A_{12} < 0$ y $B_{12} < 0$.

El programa también permite ajustar la geometría de la muestra, tanto en número de celdas como el tamaño de estas. El régimen considerado es micromagnético, siendo razonable considerar las celdas como cubos de 1-2 nanómetros de arista. Se utilizarán láminas de estas celdas (solo una celda en la dirección z), con dimensiones habituales de 100 hasta 2000 nm en las direcciones x e y . Esto significa que se pueden llegar a simular sistemas de millones de celdas o más, a mayor coste computacional. Por suerte, el código trabaja sobre GPUs y los cálculos que no dependen del tiempo se realizan en paralelo en cada uno de los 16384 núcleos presentes en la GPU utilizada. El cómputo del campo efectivo total para cada magnetización se beneficia

enormemente de esta forma de trabajar, ya que para cada paso temporal en la ecuación LLG, estos campos se actualizan basados en las $\vec{m}_i$ anteriores. Para resolver la ecuación (2.29) para cada subred

$$\frac{\partial \vec{m}_i}{\partial t} \equiv \vec{\tau}_i,$$

donde $\vec{\tau}_i$ es el torque ejercido sobre cada subred, que se puede calcular como el lado derecho de la igualdad en (2.29). Estas tres ecuaciones diferenciales se resuelven utilizando el método de Runge-Kutta de orden 4 [20].

Además de especificar constantes físicas del problema, se permite ajustar las condiciones iniciales de las magnetizaciones para forzar situaciones de interés. Esto se consigue con la potente sintaxis de mumax³ para definir formas y regiones. Una vez especificadas las condiciones iniciales, es posible utilizar condiciones periódicas para evitar efectos de borde indeseados. Dichos efectos surgen cuando se calcula el campo de intercambio para una celda sin vecinos en alguna dirección. El programa extrapola el valor de $\vec{m}_i$ fuera de la muestra si no se utilizan condiciones periódicas.

3.2. Tratamiento de datos

Todos los ajustes iniciales mencionados anteriormente se realizan a través de un archivo `.mx3` [21] que se proporciona a mumax para realizar la simulación. El programa devuelve el valor de las magnetizaciones en todas las celdas para cada instante temporal. Como además son magnitudes vectoriales, el número de datos se multiplica por tres.

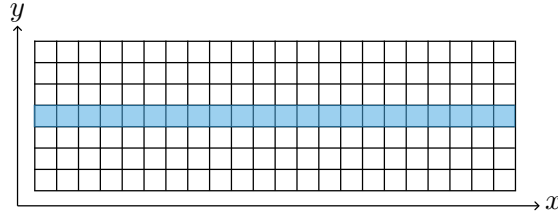


Figura 3.1: Esquema de la fila de celdas considerada para el estudio de paredes.

En ciertos casos nos va a interesar trabajar con magnetizaciones uniformes en toda la muestra, como para identificar los estados de equilibrio. Entonces podemos configurar el programa para obtener el valor de $\vec{m}_i$ como su media espacial en distintos instantes temporales, de esta forma se puede consultar la evolución temporal de cada subred de magnetizaciones en toda la muestra. Para estudiar estas situaciones se configura el programa para obtener también la magnetización de cada subred en cada celda. También se van a considerar casos en los que las magnetizaciones son uniformes únicamente en ciertas regiones de la muestra. Habitualmente realizamos las simulaciones con un muestreo de 10 ps con un tiempo simulado de 1 ns. Estos son archivos grandes ya que para cada instante temporal tendremos $3N_x \cdot N_y \cdot N_z$ valores, según el formato OVF [22]. Además se generan tres archivos con estas características en cada simulación, uno por cada subred. Aunque en la mayoría de los casos, estos archivos OVF son muy pesados ya que contienen todas las celdas y ralentizan el análisis de datos. Por lo tanto, cuando se estudia la variación espacial de las magnetizaciones, se utilizan ficheros que contienen una fila de celdas únicamente, la correspondiente a $N_y/2$ como se puede ver en la Figura 3.1. Esta fila corresponde a la central evitando así los efectos de borde que puedan darse en la muestra y también conseguimos reducir el tamaño de los archivos. Para extraer los datos relevantes y tratarlos se han escrito unas herramientas que se pueden consultar en [23].

3.3. Modelo de una dimensión. Ansatz de Walker

A pesar de que la ecuación LLG no tiene solución analítica, sería conveniente derivar un modelo aproximado que aunque obvie detalles de la distribución espacial de la magnetización pueda dar información de interés para el estudio de paredes. Por ejemplo en 1956 Walker obtuvo una solución para el caso FM asumiendo una muestra infinita en la dirección x y con anisotropía uniáxica con el eje z fácil [24]. También supone que la magnetización cambia únicamente en la dirección normal a la pared entre dominios, también llamada Domain Wall (DW). Walker propuso el perfil

$$\begin{aligned}\vartheta &= 2 \arctan \left[\exp \left(\frac{x - q}{\Delta} \right) \right], \\ \varphi &= cte,\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde ϑ y φ son los ángulos que forma la magnetización¹ con respecto a los ejes z y x respectivamente. Los parámetros q y Δ indican la posición y anchura de la DW. En particular, el ancho total de la DW se puede aproximar por Δ . Las regiones con ϑ constante forman dominios y donde cambia de forma continua forma DWs. Este tipo de modelos simplificados permiten hacer un estudio analítico de paredes magnéticas y dispositivos basados en ellas dando información relevante de propiedades estáticas como las texturas que aparecen entre dominios magnéticos y de su dinámica como la velocidad y la movilidad.

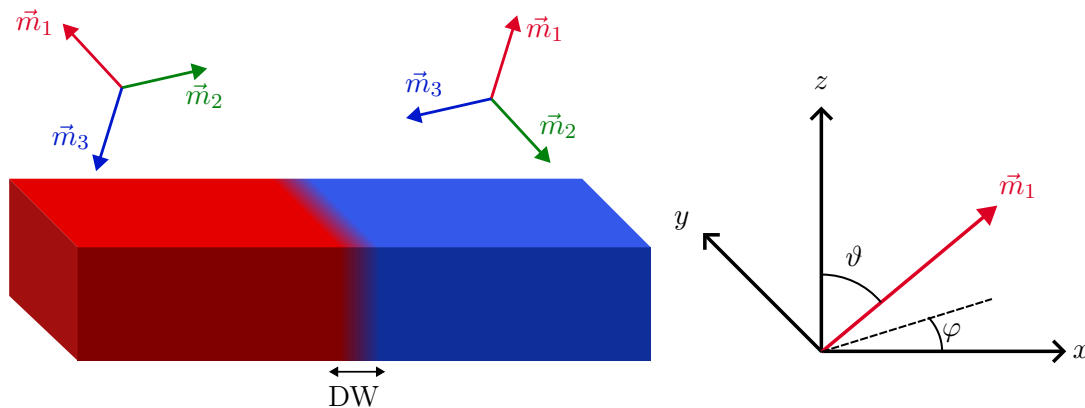


Figura 3.2: Esquema de un sistema genérico y definiciones de ϑ y φ para la magnetización de la primera subred.

Un modelo similar se ha extendido exitosamente para AFM y FiM colineales [25, 17]. No obstante, para nuestro estudio, estamos interesados en la anisotropía hexagonal de la red Kagome. Las ecuaciones (3.1) se concibieron para anisotropía uniáxica y solo una magnetización. Es necesario adaptarlas para el caso AFNC. En primer lugar, solo se estudiará un ángulo, pero a diferencia del caso anterior, será φ . Esto se debe a que la anisotropía hexagonal se manifiesta en el plano xy y necesitamos medir respecto de un eje que pertenezca a dicho plano. Otro aspecto que necesita revisión es la variación de ϑ en una DW. En el perfil de Walker los cambios entre dominios se perciben como una variación de π en ϑ . Esperamos encontrar distintos tipos paredes, a priori de 30° , 60° , 90° , 120° , 150° o 180° . Para no cambiar el modelo en cada caso se introduce el parámetro C . También se añade el factor Q , que en el caso ferromagnético indica si una DW se da para una transición entre dominios UP-DOWN o DOWN-UP, porque cuando el eje uniáxico es fácil entonces la magnetización tiene solo dos posiciones favorables,

¹Sólo se menciona una magnetización porque este modelo se propuso para estudiar materiales ferromagnéticos.

0° o 180°. En nuestro caso esperamos hasta doce direcciones fáciles de acuerdo con la ecuación 2.34, pero la idea de pasar de un estado φ_1 a otro $\varphi_2 > \varphi_1$ o viceversa es la misma que en los casos UP/DOWN. Con estas consideraciones se llega a

$$\begin{aligned}\varphi &= C \arctan \left[\exp \left(Q \frac{x-q}{\Delta} \right) \right], \\ \vartheta &= cte = \frac{\pi}{2},\end{aligned}\tag{3.2}$$

donde φ es el mismo ángulo definido anteriormente pero referido únicamente a la magnetización de la primera subred $\vec{m}_1$. Para ver la forma de este perfil, consúltase la 3.3. Se espera que el resto de magnetizaciones cumplan el modelo. Una vez se compruebe ese resultado, estudiaremos únicamente los datos correspondientes a $\vec{m}_1$.

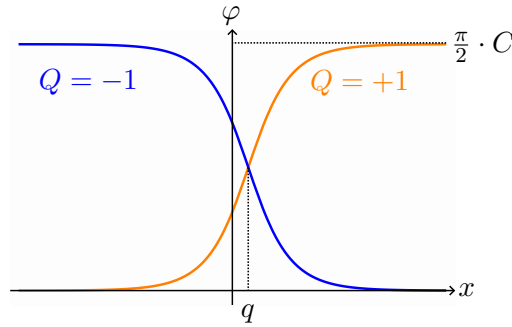


Figura 3.3: Nuevo perfil propuesto para estudiar las DW.

3.3.1. Ajuste no lineal

Una vez se tiene el valor de φ para cada celda de la fila central en cada muestra, se ajustan a la expresión (3.2). Para ello se ha utilizado la función `curve_fit()` del módulo `scipy.optimize` en Python [26, 27]. Es una herramienta muy potente que permite realizar ajustes no lineales. En nuestro caso se ha implementado el método de los mínimos cuadrados. El código se encuentra en el archivo `nonlinearfit_split.py` en el repositorio de herramientas [23].

Para realizar los ajustes seleccionamos como modelo la ecuación (3.2). Donde C se determina en función del tipo de pared estudiada y Q en función de si el primer valor de phi es mayor que el último o no. El ajuste se realiza a través de la función `curve_fit()`, que minimiza la cantidad

$$S = \sum_k \frac{(\varphi(x_k, q, \Delta, C, Q) - \phi_k)^2}{\sigma_k^2},\tag{3.3}$$

donde φ es el modelo calculado en el punto x_k y ϕ_k es el valor del ángulo acimutal calculado con los datos de la simulación en el mismo punto. El símbolo σ_k es la desviación en φ_k .

Después de realizar el ajuste, se almacenan los valores de los parámetros en la lista `popt` y sus covarianzas en el array 2D `pcov`. Los elementos diagonales de esa matriz constituyen las varianzas de cada parámetro. Por último se añade una columna de datos con el modelo ajustado y se computan los errores como la raíz de las varianzas.

3.3.2. Modelo para la anchura de la pared

También vamos a necesitar una expresión que nos relacione la anchura de la pared Δ con los parámetros del sistema. Tomamos como referencia la densidad energía superficial para un

AFM derivada en [17] pero adaptándola para nuestro caso, teniendo en cuenta únicamente las interacciones de anisotropía e intercambio. En particular se han incluido sumandos adicionales para contemplar las interacciones de intercambio con la nueva subred. Como ya se mencionó anteriormente en el 2, todas las constantes interlattice son iguales. Además $\vartheta_i = \pi/2$ para todas las subredes ya que nos centraremos en casos con magnetizaciones completamente localizadas en el plano xy . Con estas modificaciones se obtiene

$$\sigma = \frac{4A_{11}}{\Delta} - \frac{2A_{12}}{\Delta} + 4K_{3b}\Delta. \quad (3.4)$$

Siguiendo un procedimiento análogo al de los materiales ferromagnéticos [12], que involucra realizar derivadas parciales y variacionales sobre la densidad de energía superficial, y aplicar la ecuación LLG 2.10 en coordenadas esféricas, se llega a una expresión para la dinámica de la anchura de la DW

$$\frac{\dot{\Delta}}{\Delta} = \frac{A_{12}}{\Delta^2} - 2\frac{A_{11}}{\Delta^2} + 2K_{3b}. \quad (3.5)$$

Como solo vamos a considerar el caso estático, esta cantidad es nula y podemos despejar un valor para la anchura de la pared. No obstante teniendo en cuenta que este modelo se ha desarrollado para paredes de 180° es de esperar que aparezca un factor menor que la unidad en la expresión para Δ dado que la rotación total es menor.

$$\Delta \propto \sqrt{\frac{2A_{11} - A_{12}}{2K_{3b}}}. \quad (3.6)$$

Capítulo 4

Resultados y discusión

Tras desarrollar la teoría necesaria para entender los fenómenos a simular y haber detallado los métodos empleados para extraer información de estas, pasemos a los resultados obtenidos para casos de interés.

4.1. Estados de equilibrio para anisotropía hexagonal

A lo largo del estudio nos centraremos únicamente en casos estáticos. Aunque consultaremos la dinámica de los resultados para cerciorarnos de que se ha alcanzado el equilibrio, no se tratarán esos datos. Empecemos por identificar los estados de equilibrio del sistema. Antes de simular con valores arbitrarios de los parámetros materiales, estudiemos con más detenimiento la superficie de energía de anisotropía.

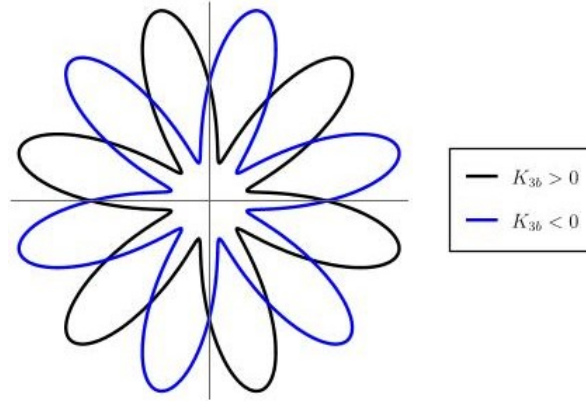


Figura 4.1: Cortes en el plano xy a las superficies de energía $K_1 < 0$ para valores positivos y negativos de K_{3b} . En esta superficie, mínimos indican direcciones fáciles.

Como la anisotropía hexagonal se manifiesta en el plano xy , solo estudiaremos el caso en que el eje z sea difícil ($K_1 < 0$). Si realizamos un corte a las superficies 2.1c, 2.1d para $\theta = \pi/2$ se aprecian direcciones fáciles y difíciles en el plano basal como se muestra en la Figura 4.1. Los ángulos que definen esas direcciones corresponden a los extremos relativos de la función $\sin(6\phi)$. El papel de máximo o mínimo se intercambia de acuerdo al signo de K_{3b} , así que esperamos observar las magnetizaciones en unos estados u otros ajustando el valor de esta constante. En particular, los mínimos de energía indican que una dirección es fácil.

Realicemos en primer lugar simulaciones para condiciones iniciales aleatorias y uniformes en

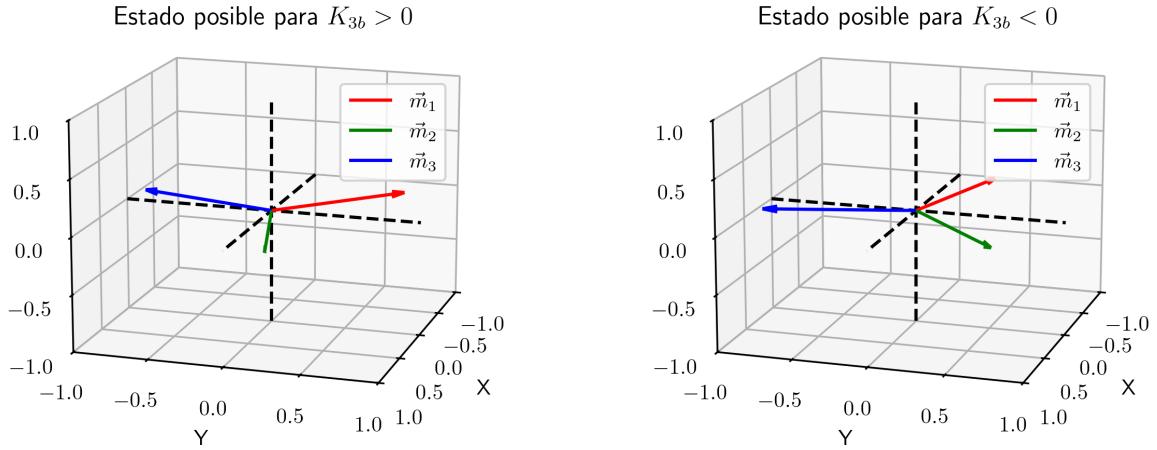


Figura 4.2: Representación vectorial del promedio espacial de las magnetizaciones en el estado final.

toda la muestra, con objetivo de ver si el sistema evoluciona a los estados esperados. Como el objetivo de estas primeras simulaciones no son encontrar texturas o estudiar dependencia espacial, se realizan en un tamaño reducido de $64 \text{ nm} \times 64 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ usando celdas de arista 1 nm . En estudios previos, se ha determinado el orden de magnitud de las constantes para obtener resultados acordes a la realidad. Tomaremos los siguientes valores para las constantes:

$$A_{11} = 10 \text{ pJ/m}, \quad A_{12} = -5 \text{ pJ/m}, \quad B_{12} = -20 \text{ MJ/m}^3$$

$$K_1 = -1 \text{ MJ/m}^3, \quad K_{3b} = 0,1 \text{ MJ/m}^3, \quad \alpha = 1$$

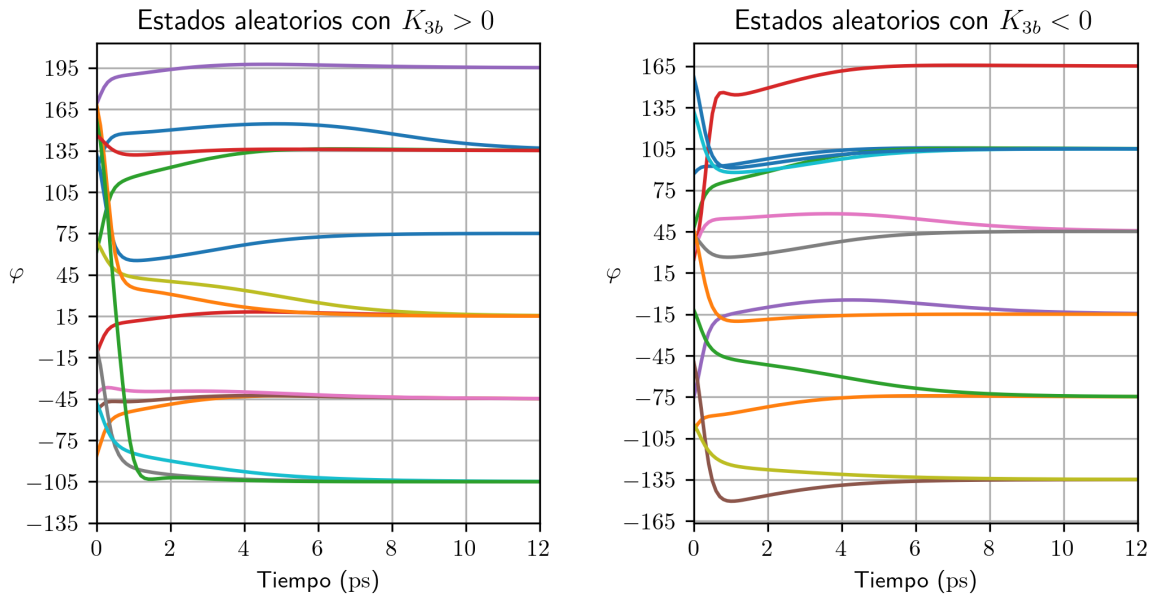


Figura 4.3: Evolución temporal del ángulo azimutal de la magnetización $\vec{m}_1$ para simulaciones con estados iniciales aleatorios.

Donde, recordemos, α es el parámetro de amortiguamiento adimensional de la ecuación LLG (2.10). Como de momento no estamos interesados en valores realistas de la dinámica, únicamente en estados finales, ajustar este valor a 1 garantiza una evolución temporal más rápida.

Como cabe esperar, todos los estados terminan en el plano basal independientemente de sus configuraciones iniciales. Si nos fijamos en los resultados finales (Figura 4.2) podemos ver que las magnetizaciones $\vec{m}_2$ y $\vec{m}_3$ se encuentran a 120° y 240° de $\vec{m}_1$ respectivamente. Lo que nos permite estudiar solo una de las tres magnetizaciones, escogemos $\vec{m}_1$ como la principal. Además $\varphi_1 \equiv \varphi$ toma valores muy concretos. Si repetimos las simulaciones para otras condiciones iniciales aleatorias pero asignando $K_{3b} = -0,1 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$ se obtienen un conjunto equivalente de ángulos pero girados 30° (Figura 4.3). Desplazando todos ellos al rango $0^\circ - 360^\circ$ y asignando el signo de K_{3b} correspondiente tenemos

- $K_{3b} > 0$: $15^\circ, 75^\circ, 135^\circ, 195^\circ, 255^\circ, 315^\circ$
- $K_{3b} < 0$: $45^\circ, 105^\circ, 165^\circ, 225^\circ, 285^\circ, 345^\circ$

Que justamente coinciden con los los mínimos de la función $-K_{3b} \sin(6\phi)$ como aparece en (2.34). A la vista de los resultados, todos ellos corresponden a ángulos de la forma

$$\varphi = n \cdot 30^\circ + 15^\circ \quad n \in \mathbb{Z} \quad (4.1)$$

con n par en los casos $K_{3b} > 0$ e impar para $K_{3b} < 0$. Se propone clasificar los estados como $(n+1)^{\text{signo}}$. Donde n es el de la expresión (4.1) y *signo* es el correspondiente a K_{3b} tal y como se muestra en la Figura 4.4.

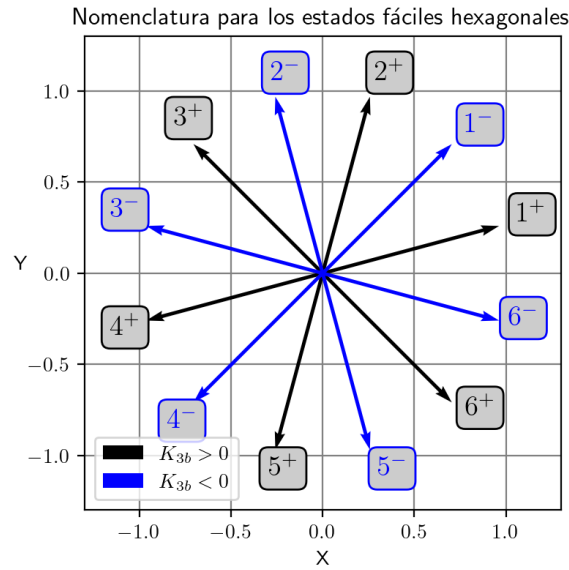


Figura 4.4: Nomenclatura de la posición de la magnetización $\vec{m}_1$ para los estados fáciles de la anisotropía hexagonal.

4.2. Estudio de las paredes entre dominios

Ahora que conocemos los estados de equilibrio en presencia de anisotropía hexagonal, podemos pasar a estudiar las posibles texturas magnéticas que puedan aparecer en estos materiales. Son justo estas texturas las que nos van a permitir funcionalizar los dispositivos basados en estos materiales, ya sean de almacenamiento magnético o lógicos. Las texturas magnéticas más sencillas son las paredes entre dominios que es lo que vamos a estudiar en este trabajo. Para ello vamos a configurar la muestra con esos estados en distintas regiones y dejar al sistema

evolucionar. La geometría que vamos a estudiar consiste en dividir el sistema a lo largo del eje x en dos mitades y ajustar las condiciones iniciales en cada mitad a un estado de equilibrio. Las muestra que vamos a considerar en todos los apartados tendrá una celda computacional de espesor en la dirección z . Primero vamos a considerar que los parámetros materiales son idénticos en todas las celdas. Después de conocer los tipos de paredes en sistemas homogéneos repetiremos el experimento cambiando el signo de K_{3b} en cada mitad. En ningún caso vamos a modificar las constantes de intercambio.

4.2.1. Caso con anisotropía homogénea

Las constantes que se usarán en esta sección toman los valores

$$\begin{aligned} A_{11} &= 10 \text{ pJ/m}, & A_{12} &= -5 \text{ pJ/m}, & B_{12} &= -20 \text{ MJ/m}^3 \\ K_1 &= -0,1 \text{ MJ/m}^3, & K_{3b} &= 0,01 \text{ MJ/m}^3, & \alpha &= 1 \end{aligned}$$

El tiempo que dejaremos evolucionar el sistema es de 1 ns. Las dimensiones de la muestra son $N_x = 512$ y $N_y = 128$ celdas en las direcciones x e y . Cada una de ellas con 1 nm de arista. Las condiciones iniciales para las magnetizaciones son

$$\begin{aligned} \vec{m}_1 &= (\cos(\varphi), \sin(\varphi), 0) \\ \vec{m}_2 &= (\cos(\varphi + 2\pi/3), \sin(\varphi + 2\pi/3), 0) \\ \vec{m}_3 &= (\cos(\varphi + 4\pi/3), \sin(\varphi + 4\pi/3), 0) \end{aligned} \tag{4.2}$$

para garantizar que empiezan en el plano y separadas 120° entre ellas. El valor de φ vendrá dado por (4.1) y será distinto en cada mitad de la muestra. Pero como la constante de anisotropía hexagonal es positiva, escogeremos solo estados fáciles para signo positivo. Para no realizar pruebas redundantes, se dejará el lado izquierdo del sistema siempre con el estado 1^+ y el derecho se iniciará con n^+ ($n \neq 1$).

Paredes simples

El primer caso que vamos a simular es enfrentar los estados $1^+ - 2^+$. Para ver el perfil de la pared se tomarán los ángulos acimutales de las magnetizaciones de la fila central tal y como se muestra en la [Figura 3.1](#).

Los ángulos φ obtenidos para las tres magnetizaciones son iguales a excepción de una fase de 120° como puede apreciarse en la [Figura 4.5](#). A partir de ahora solo se representará el ángulo correspondiente a $\vec{m}_1$. La pared se forma en el centro de la muestra, en el punto en que cambian las condiciones iniciales. Las coordenadas usadas están centradas en la celda $N_x/2$ y en la figura se ha ampliado el eje x para observar con más claridad el perfil de la pared.

De estos resultados extraemos que se van a dar paredes de 60° , que en este caso es justo la diferencia angular entre los estados fáciles seleccionados. La anchura de la pared es de unos 64 nm, que es del orden de magnitud esperado dado el orden de magnitud del intercambio y la anisotropía. Veamos qué sucede si los estados iniciales difieren en más de 60° .

Paredes múltiples

Vamos a estudiar a hora las situaciones en las que el ángulo total que tiene que rotar cada subred es mayor a 60° , por ejemplo 120° enfrentando los estados $1^+ - 3^+$. En este caso el sistema estabiliza en una configuración con dos paredes de 60° , lo que significa que es

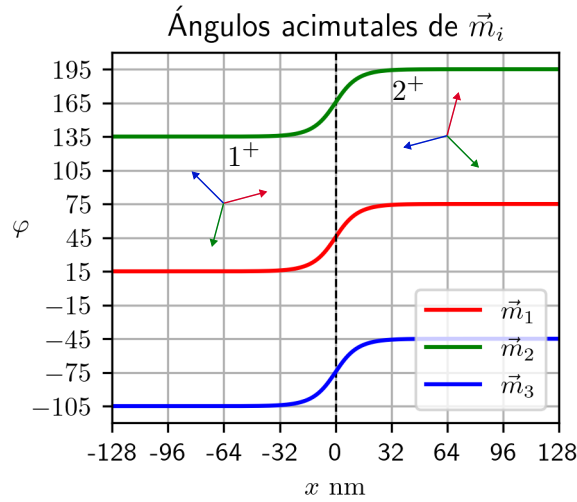


Figura 4.5: Ángulos acimutales para las tres magnetizaciones en la fila central. Perfil $1^+ - 2^+$.

energéticamente más favorable encadenar las transiciones $1^+ - 2^+ - 3^+$ que formar una pared de 120° . En el caso en que los estados difieran 180° , por ejemplo enfrentando $1^+ - 4^+$, el sistema estabiliza en una configuración con tres paredes intermedias siguiendo la secuencia $1^+ - 2^+ - 3^+ - 4^+$. Concluimos entonces que las transiciones de más de 60° van a ser mediadas por paredes simples (Ver Figura 4.6).

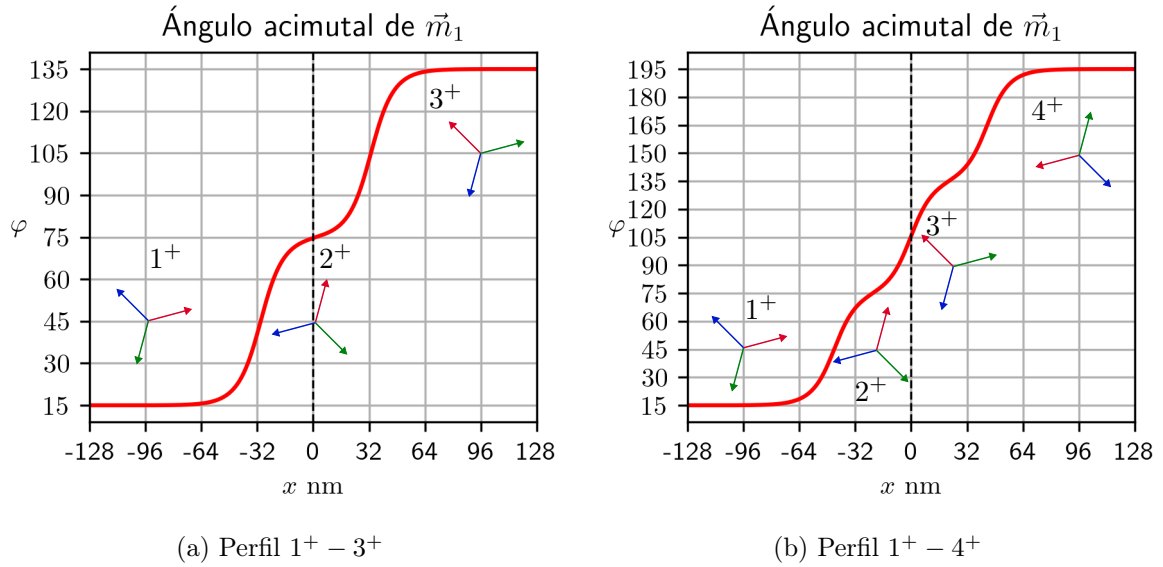


Figura 4.6: Perfiles de las paredes múltiples.

Paredes inversas

Para el caso ferromagnético con anisotropía uniáxica se dan paredes de 180° . A los dos estados posibles cuando el eje es fácil se les llama UP y DOWN. El perfil que se obtiene para esas paredes puede ser una transición UP-DOWN o DOWN-UP. Algo similar sucede en nuestro caso, pero existen más estados posibles. El equivalente a una pared DOWN-UP se da en los casos $1^+ - 5^+$ y $1^+ - 6^+$ (Figura 4.7).

Con estos resultados cubrimos todos los tipos de paredes posibles para una muestra homogénea. El estudio para un valor de $K_{3b} = -0,01 \text{ MJ/m}^3$ es redundante ya que se obtienen los mismos datos pero desplazados 30° para que coincidan con los estados fáciles propios para esa constante, se han seleccionado algunos ejemplos de esas simulaciones en la [Figura 4.8](#). En cambio, modificar los valores absolutos para las constantes de anisotropía hexagonal y de intercambio si tienen efectos relevantes en las paredes, pero esto se contemplará en la última sección del capítulo. Antes de eso, falta estudiar un caso en que la anisotropía hexagonal no sea del mismo tipo en toda la muestra.

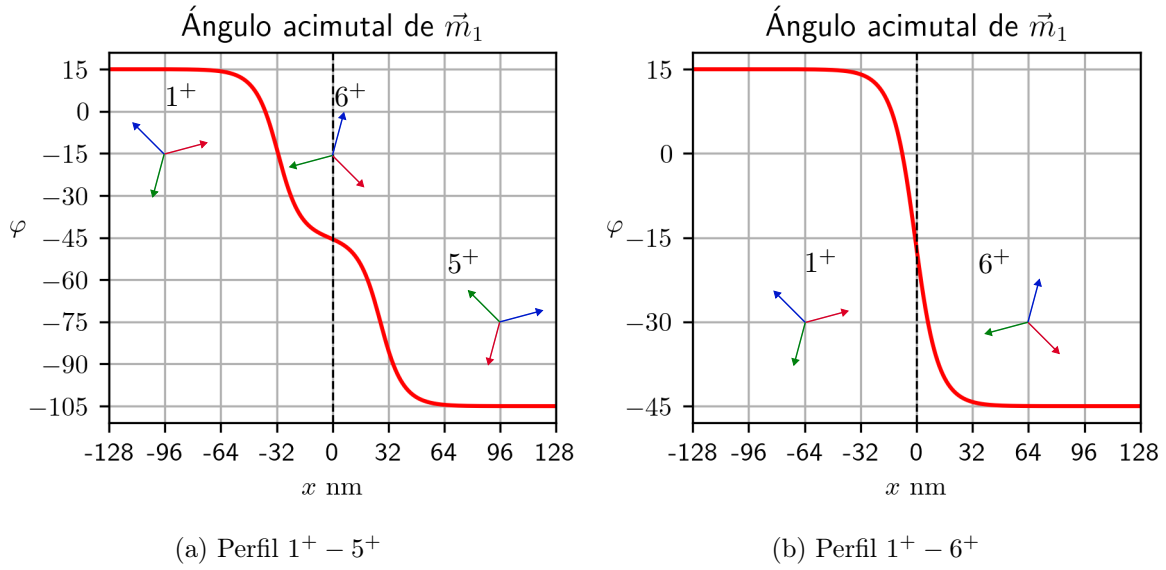


Figura 4.7: Perfiles de las paredes inversas.

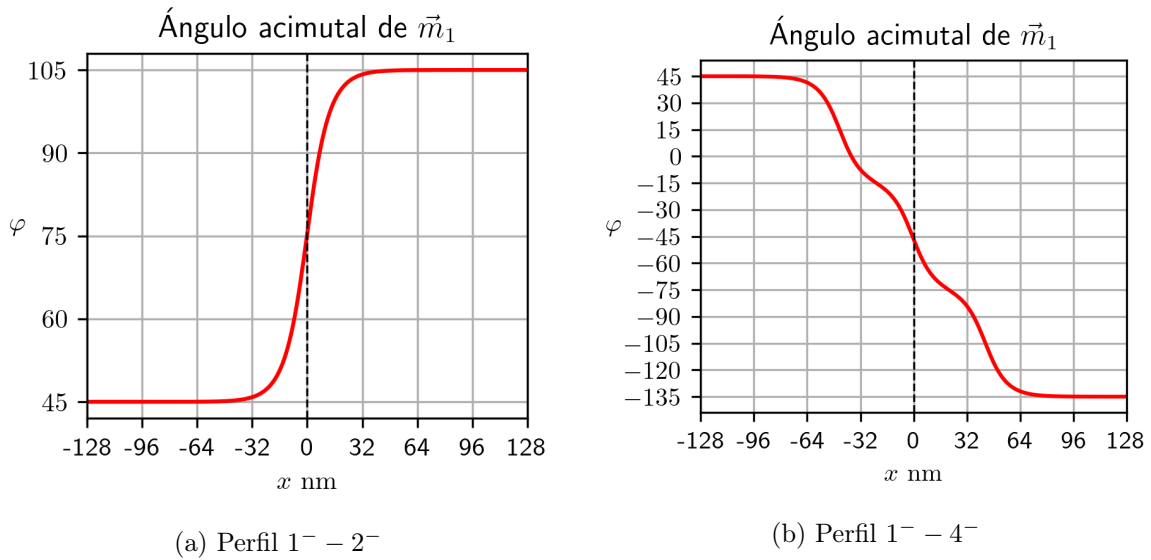


Figura 4.8: Ejemplos de paredes en el caso homogéneo con $K_{3b} < 0$. Las texturas obtenidas son las mismas pero desplazadas 30° .

4.2.2. Caso con anisotropía no homogénea

Veamos que sucede si el valor de K_{3b} cambia en cada mitad de la muestra. En un material real se podría conseguir este efecto creciendo planos Kagome rotados 30° , de esta forma rotando también los ejes fáciles la misma cantidad. También es esperable conseguirlo aplicando campo eléctrico o tensión en una región de la muestra. Se tomarán las mismas constantes que en el caso homogéneo a excepción del signo de K_{3b} . También coinciden las dimensiones y tiempo de simulación.

Las condiciones iniciales se ajustan al valor de K_{3b} en cada región, que será positivo en la parte izquierda ($x < 0$) y negativo en la derecha ($x > 0$). Solo modificamos el signo, ya que su valor absoluto afecta a la anchura de la pared y puede llevarnos a perfiles no simétricos. Por lo tanto enfrentamos el estado 1^+ en el lado izquierdo con los todos los posibles estados n^- en el derecho.

Paredes simples

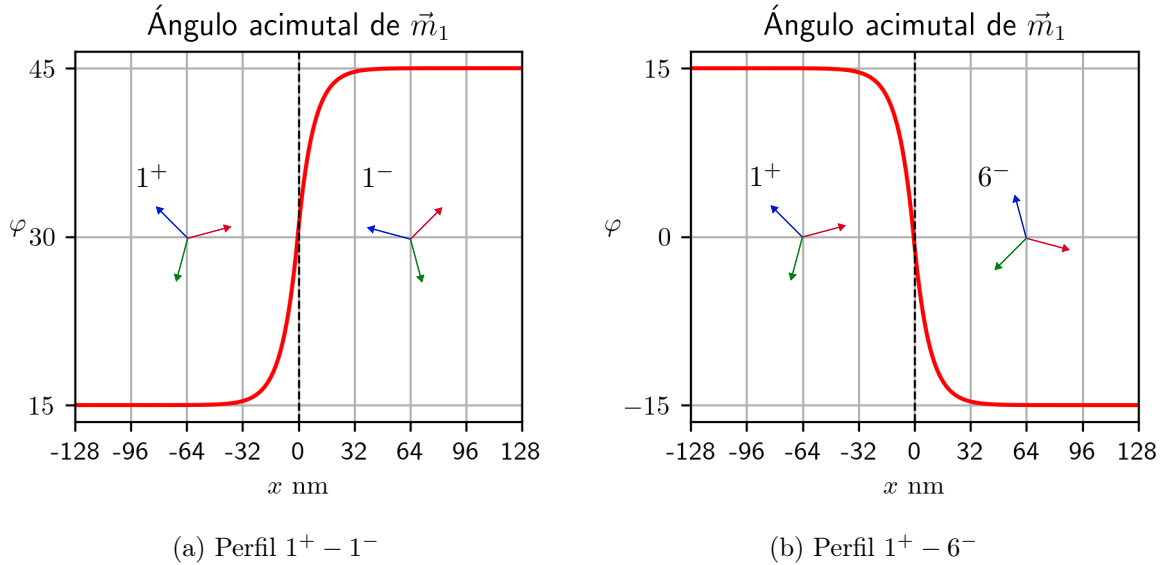


Figura 4.9: Perfiles de las paredes simples para muestra no homogénea.

Para observar paredes con el menor ángulo posible vamos a enfrentar un dominio en el estado 1^+ con los dominios en 1^- y 6^- . La diferencia angular entre dominios es de 30° , lo que obliga al sistema a evolucionar a una configuración con una pared que separe estados esa cantidad. La variación de φ en x a lo largo de la pared toma la misma forma que la obtenida en el caso homogéneo. Como se puede ver en la [Figura 4.9b](#) también existen paredes inversas en el caso no homogéneo. Estas también se van a dar en las situaciones $1^+ - 5^-$ y $1^+ - 4^-$. Para no saturar la cantidad de gráficas se van a obviar los casos inversos desde ahora.

Paredes múltiples

El siguiente paso es enfrentar estados que difieran más de 30° . En los resultados para el caso $1^+ - 2^-$ ([Figura 4.10](#)) podemos ver que surgen dos paredes con un dominio intermedio, de forma análogo que ocurría en las muestras homogéneas. Pero a diferencia del caso homogéneo, la naturaleza de las paredes es distinta. La pared de 30° se da siempre en el centro de la

muestra, porque los estados fáciles más próximos angularmente en ambos lados difieren en esa cantidad. Pero esa pared no cubre los 90° de diferencia entre las condiciones iniciales. Se requiere un dominio intermedio entre estados fáciles de una de las regiones.

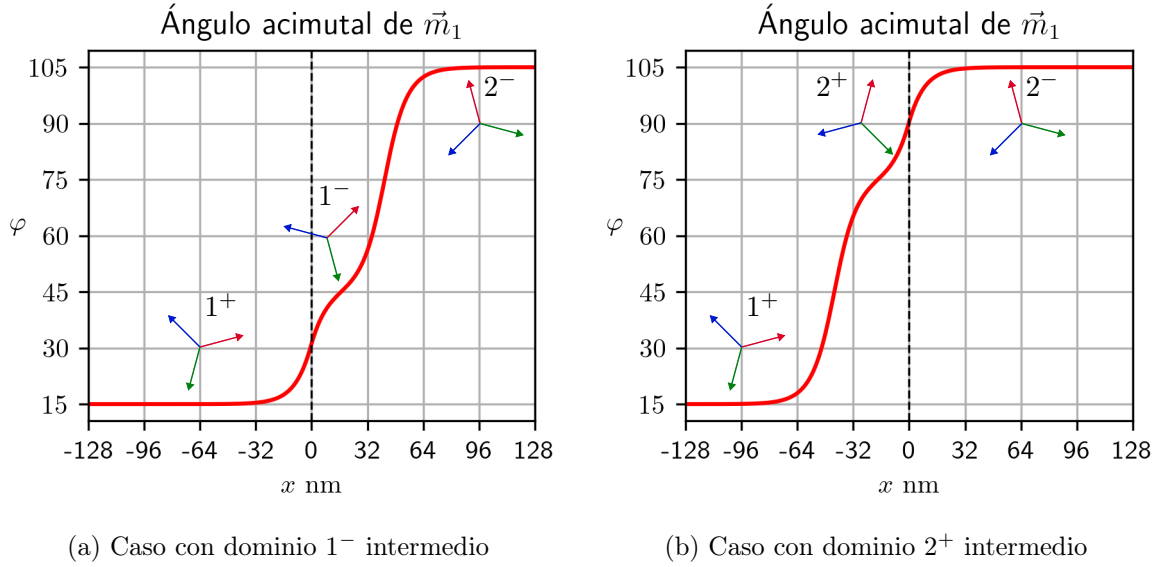


Figura 4.10: Perfiles de las paredes $1^+ - 2^-$.

Al simular con condiciones iniciales discontinuas para $x = 0$ se obtuvo el caso con el dominio 1^- intermedio en el lado derecho, tal y como se ve en la Figura 4.10. Como no hay motivos para que el sistema prefiera esa configuración al dominio intermedio 2^+ , se repitió la simulación pero esta vez forzando el estado fácil del lado derecho (2^-) 1 nm hacia x negativas. Con este arreglo se obtiene la configuración deseada. La explicación más plausible para esta preferencia es un error numérico en las condiciones iniciales.

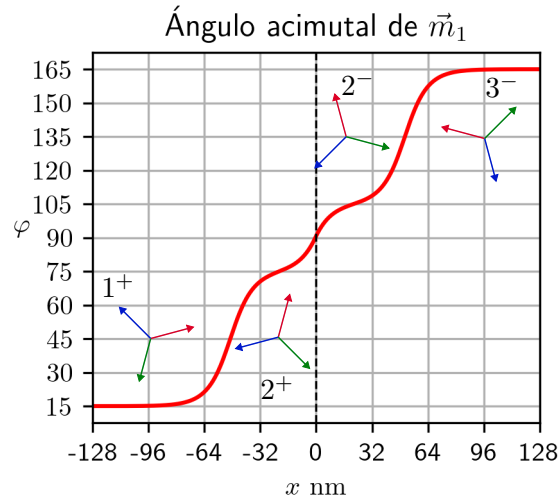
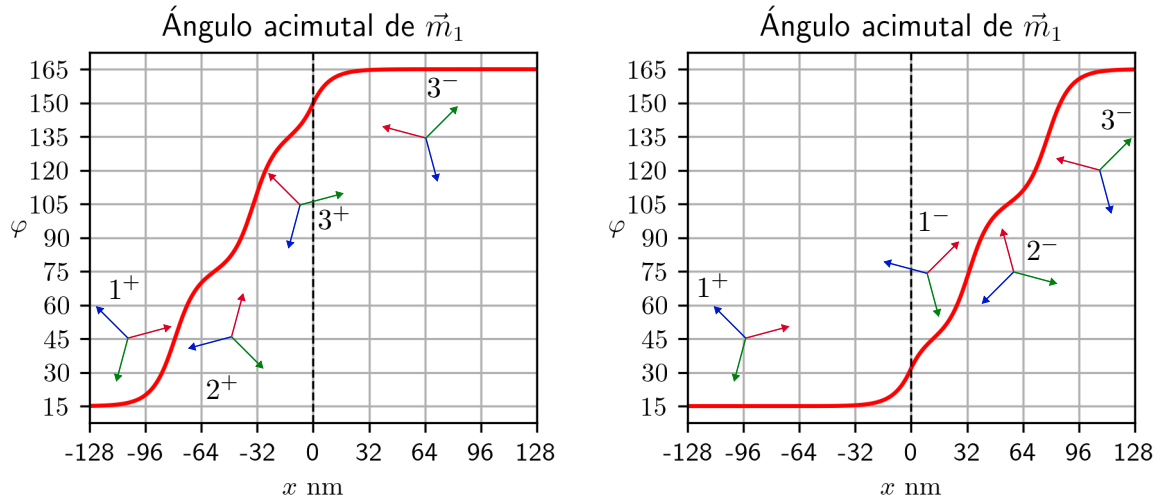
Ahora vamos a enfrentar los estados con una transición de 150° , por ejemplo $1^+ - 3^-$. Como cabría esperar, surgen dominios intermedios y como en el caso anterior, una pared de 30° en $x = 0$. La diferencia angular total entre estados es de 150° , por haber regiones con distinto signo K_{3b} surge la pared de 30° obligatoriamente y la diferencia restante se reparte en dos paredes de 60° .

La disposición de esas paredes es, en principio, igual de favorable energéticamente. Usando condiciones iniciales discontinuas en $x = 0$ se obtiene una configuración simétrica (Figura 4.11). En cambio si contaminamos una región a la izquierda o derecha del centro con el estado 3^+ o 2^- respectivamente, obtenemos configuraciones asimétricas (Figura 4.12).

Con esto hemos terminado de identificar todos los tipos de pared que esperamos encontrar enfrentando dominios con magnetizaciones en estados fáciles para la anisotropía hexagonal.

4.3. Estudio de la anchura de las paredes

En esta sección se va a aplicar el perfil de Walker modificado (3.2) para determinar la anchura y posición de las paredes identificadas en el apartado anterior. Pretendemos con ello dar los primeros pasos para desarrollar un modelo analítico simplificado que facilite el desarrollo de dispositivos prácticos basados en estos materiales. Primero veamos si es posible reducir el estudio únicamente a un par de casos sencillos en vez de considerar todos los tipos de paredes. Después se va a estudiar la dependencia del parámetro Δ en función de las constantes de

Figura 4.11: Perfil $1^+ - 3^-$ simétrico.(a) Caso con dominios 2^+ y 3^+ intermedios(b) Caso con dominios 1^- y 2^- intermediosFigura 4.12: Perfiles de las paredes $1^+ - 3^-$ asimétricos.

anisotropía hexagonal e intercambio, parámetro que nos dará una idea del tamaño mínimo en los dominios de estos sistemas.

4.3.1. Equivalencia entre paredes

A pesar de haber distinguido entre numerosos perfiles de pared, realmente solo existen dos tipos fundamentales en nuestro sistema: paredes de 30° y paredes de 60° . Con esta idea, medimos la anchura de las paredes intermedias en todos los casos anteriores dividiendo los resultados en estos dos tipos básicos y luego los comparamos entre sí. Se han simulado todos los perfiles a excepción de los casos en que se forzó la posición de las paredes a un lado u otro del centro de la muestra. Las dimensiones son $512 \text{ nm} \times 128 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ con celdas de 1 nm

de arista. El resto de parámetros relevantes toman los valores

$$A_{11} = 10 \text{ pJ/m}, \quad A_{12} = -5 \text{ pJ/m}, \quad B_{12} = -20 \text{ MJ/m}^3$$

$$K_1 = -0,1 \text{ MJ/m}^3, \quad K_{3b} = \pm 0,01 \text{ MJ/m}^3, \quad \alpha = 1$$

Para extraer el parámetro Δ en una pared simple solo hay que realizar el ajuste no lineal de los datos con el modelo propuesto (3.2). Pero en los casos con paredes múltiples es necesario dividir la curva en regiones que contengan una pared. Para poder realizar los ajustes, necesitamos extender los datos ausentes en las zonas de los dominios incompletos. El criterio que se ha tomado para dividir los datos consiste en buscar los mínimos relativos en la derivada numérica en la dirección x para φ .

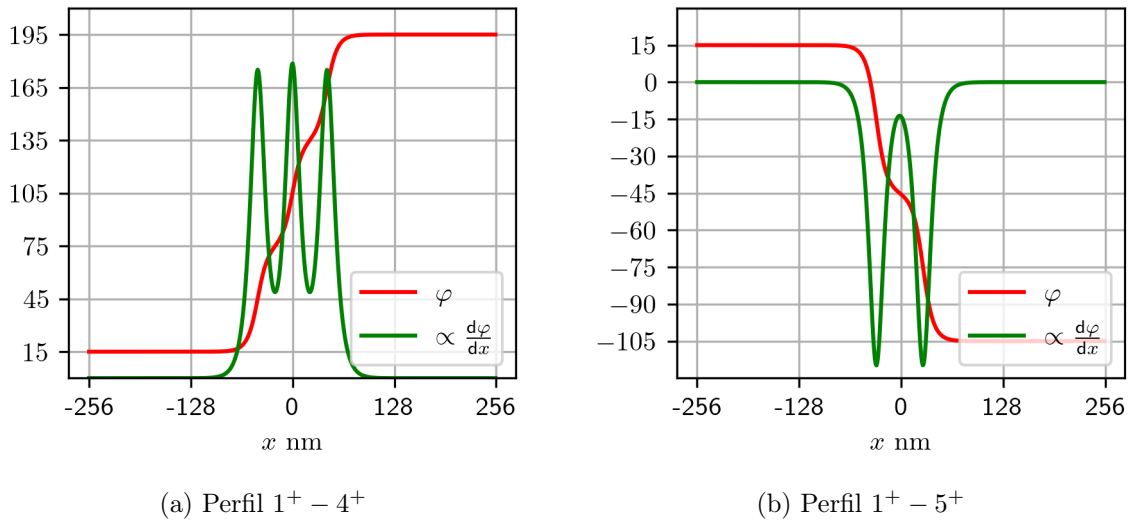


Figura 4.13: Curvas de φ y curvas proporcionales a sus gradientes en x .

Se espera encontrar paredes con distintas anchuras. Sin embargo como en las regiones intermedias tenemos dominios incompletos la pendiente del ángulo con la distancia no llega a anularse. Como a priori no se sabe que valores tiene la pendiente en los límites entre paredes, el código utilizado tiene una tolerancia variable para encontrar mínimos. Si los valores máximo y mínimo de un segmento se diferencian en más de 75° (un valor superior a 60° sin estar muy próximo para evitar errores) reduce la tolerancia. Si por el contrario esa diferencia no supera los 20° , entonces se esta cortando la pared en un punto intermedio, se aumenta la tolerancia y se repite el proceso.

Una vez identificadas las paredes individuales, es momento de realizar el ajuste para cada una. Basándonos en los resultados de las secciones anteriores podemos ajustar manualmente los valores de C y Q . Así el proceso de mínimos cuadrados solo tiene que determinar los parámetros q y Δ . Como solo hemos encontrado paredes de 30° y 60° , C tiene que tomar los valores $2/3$ y $1/3$. Si el programa detecta que la diferencia entre el valor de φ más alto y el más bajo supera un valor intermedio, se ha escogido 45° , entonces el ajuste se realiza con $C = 2/3$, en el caso contrario $C = 1/3$. El valor de Q se elige de acuerdo al criterio establecido en la Subsección 3.3.1. Las expresiones finales son

$$\varphi_{60^\circ} = \frac{2}{3} \arctan \left[\exp \left(Q \frac{x - q}{\Delta} \right) \right], \quad (4.3)$$

$$\varphi_{30^\circ} = \frac{1}{3} \arctan \left[\exp \left(Q \frac{x - q}{\Delta} \right) \right]. \quad (4.4)$$

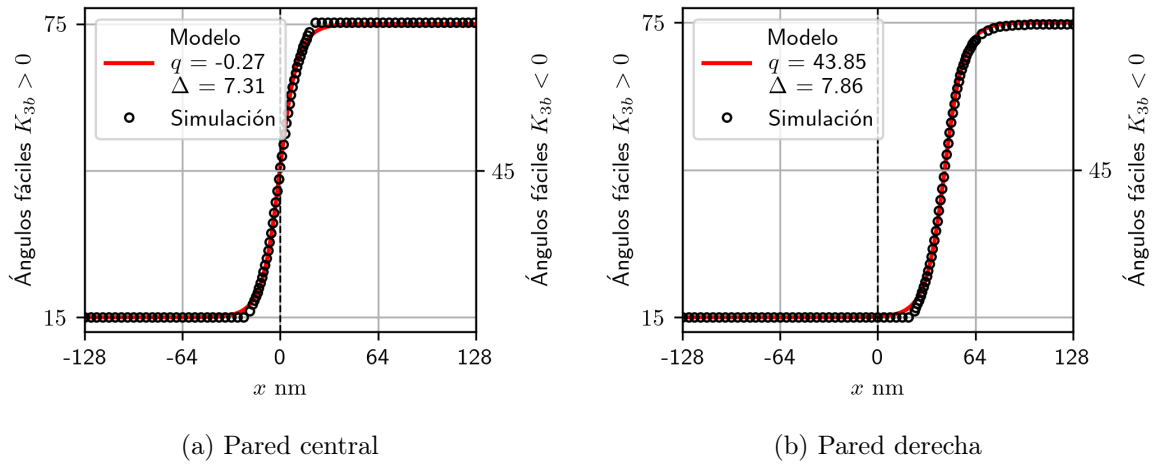


Figura 4.14: Ejemplos de ajustes de paredes individuales extraídas de un perfil $1^+ - 4^+$. En los límites de la pared se aprecia el punto de corte de los datos reales, el lado izquierdo para (b) y ambos lados en (a).

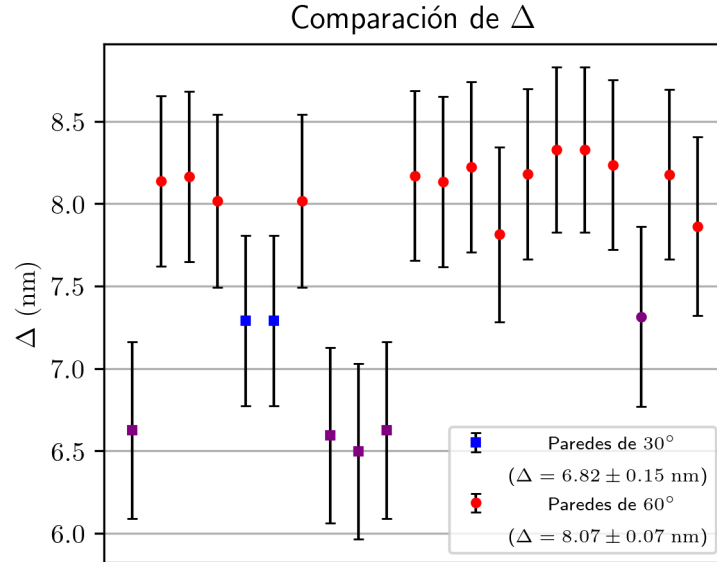


Figura 4.15: Valores medios de Δ y sus errores estándar para todas las paredes individuales en cada perfil posible. En púrpura se han marcado los casos que más se desvían del valor medido para una pared simple.

Los ajustes muestran valores de Δ semejantes a excepción de los correspondientes a paredes centrales, marcados de color púrpura en la Figura 4.15. Un ejemplo de estos ajustes se puede ver en la Figura 4.14a. A diferencia de las curvas para paredes que empiezan o terminan la transición entera, ninguno de sus extremos está compuesto por datos reales. De esta forma la transición es más abrupta y se mide menor anchura. Considerando que tenemos una discretización gruesa por el mallado de la muestra consideramos una incertidumbre mínima de $\pm 0,5$ nm. También se ha calculado el error con la desviación estándar de los datos, pero en cualquier caso es mucho menor que el error de la discretización espacial.

Si ajustamos las condiciones iniciales en un entorno simétrico de ± 64 nm en el centro de la muestra y en él fijamos φ a un valor intermedio, se obtienen paredes más separadas. Esto puede ser un indicio de que en el caso anterior no hemos obtenido paredes totalmente relajadas,

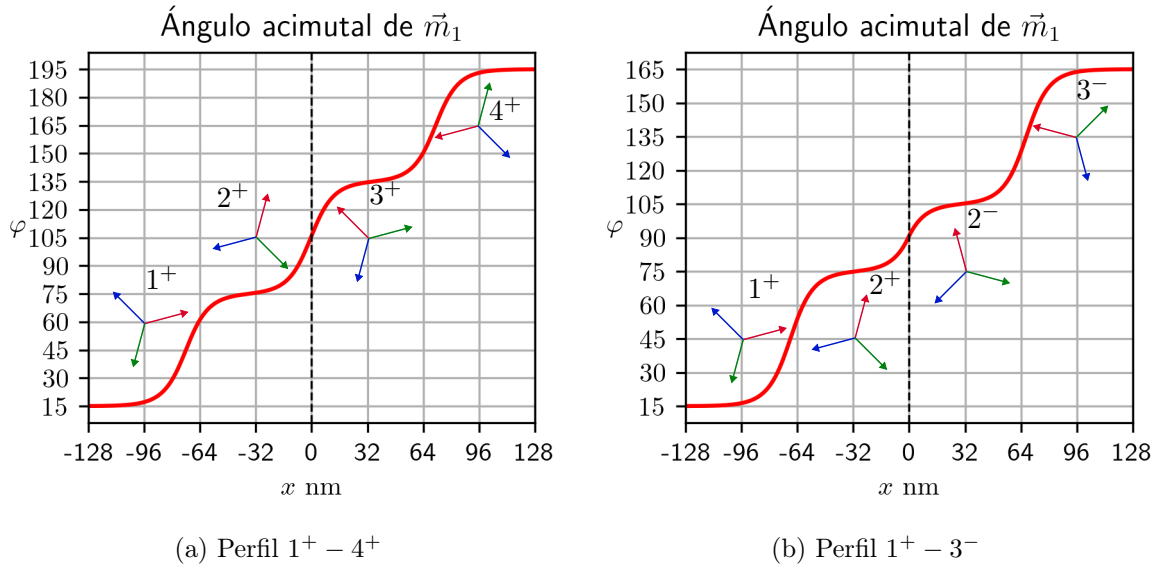
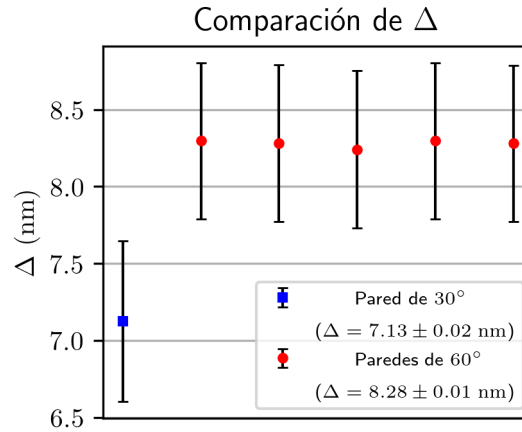


Figura 4.16: Perfiles con tres paredes separadas.

incluyendo un error mayor en la anchura. Tomaremos como anchura de la pared en el caso no homogéneo como la obtenida en esta segunda tanda de simulaciones. Se han tomado $\varphi = 105^\circ$ para el caso homogéneo y 90° para el no homogéneo. De esta forma la zona de solapamiento entre curvas se reduce y el error cometido al aislarlas es menor (Figura 4.16). Volviendo a medir Δ para las paredes intermedias en los perfiles $1^+ - 4^+$ y $1^+ - 3^-$ obtenemos unos valores mucho más cercanos a los medidos en paredes simples.

Figura 4.17: Valores medios de Δ para los casos problemáticos con mayor separación entre paredes.

$$\begin{aligned} \Delta_{simple}^{60^\circ} &= (8,3 \pm 0,5) \text{ nm} & \Delta_{simple}^{30^\circ} &= (7,3 \pm 0,5) \text{ nm} \\ \Delta^{60^\circ} &= (8,3 \pm 0,5) \text{ nm} & \Delta^{30^\circ} &= (7,1 \pm 0,5) \text{ nm} \end{aligned}$$

Concluimos que es razonable estudiar únicamente los perfiles simples para medir la anchura de la pared. Las paredes de 30° se medirán en perfiles $1^+ - 1^-$ y las de 60° en perfiles $1^+ - 2^+$. A continuación vamos a realizar ajustes modificando las constantes de intercambio y anisotropía.

4.3.2. Dependencia con la constante de anisotropía

El objetivo de esta sección es medir la anchura de la pared Δ y estudiar su dependencia con el parámetro K_{3b} . Para simular un rango amplio de valores de Δ hemos configurado la muestra con un tamaño de $1024 \text{ nm} \times 128 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ con celdas de 1 nm de arista, para así evitar que la anchura de la pared sea comparable con la longitud total. Se han tomado los siguientes valores de las constantes

$$\begin{aligned} A_{11} &= 10 \text{ pJ/m}, & A_{12} &= -5 \text{ pJ/m}, & B_{12} &= -20 \text{ MJ/m}^3 \\ K_1 &= -0,1 \text{ MJ/m}^3, & \alpha &= 1 \end{aligned}$$

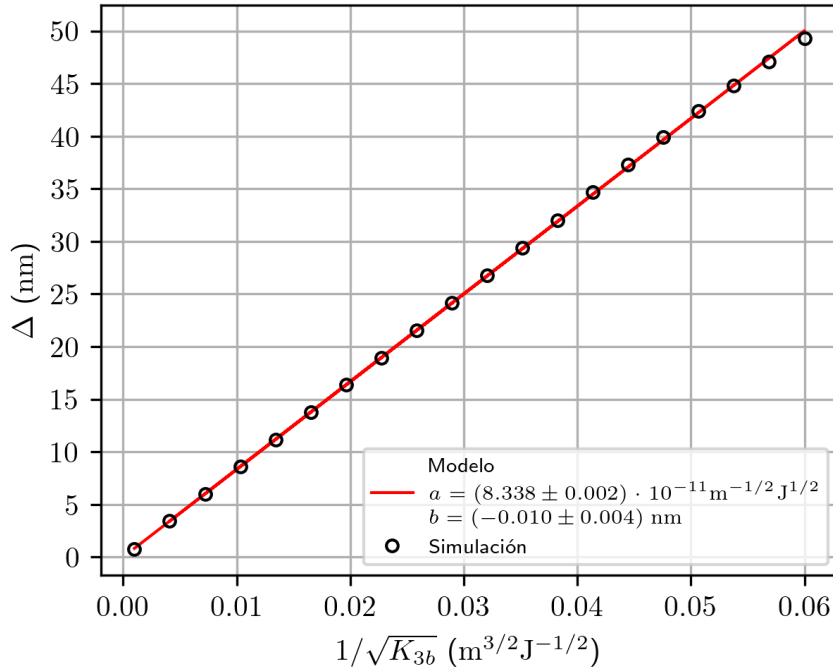


Figura 4.18: Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(K_{3b})^{-1/2}$ para el caso K_{3b} homogéneo.

Esperamos encontrar una dependencia $\Delta \propto 1/\sqrt{K_{3b}}$ de acuerdo al modelo propuesto en la ecuación (3.6), así que tomaremos valores de K_{3b} de forma que estén equiespaciados con esa dependencia. Los K_{3b} escogidos pertenecen a un rango de entre 100 J/m^3 y 10 MJ/m^3 . Como observamos en la sección anterior, las paredes de 30° son ligeramente más estrechas que las de 60° . Así que realizaremos dos tandas de simulaciones para los mismos valores de K_{3b} , primero en una muestra homogénea en dicha variable y después cambiando el signo para cada mitad.

Los ajustes mostrados en las figuras 4.18 y 4.19 confirman que el modelo propuesto describe satisfactoriamente, al menos, la dependencia de Δ con respecto a K_{3b} . Podemos despreciar el valor de la ordenada en el origen para ambos casos, su valor es de dos órdenes de magnitud inferior al nanómetro y nuestra discretización es mucho más gruesa. Las pendientes del ajuste lineal son

$$\begin{aligned} a^{60^\circ} &= (8,338 \pm 0,002) \cdot 10^{-11} \text{ m}^{-1/2} \text{ J}^{1/2} \\ a^{30^\circ} &= (7,37 \pm 0,01) \cdot 10^{-11} \text{ m}^{-1/2} \text{ J}^{1/2} \end{aligned}$$

Las incertidumbres reflejadas dan cuenta únicamente de la desviación de los datos ajustados, sin haber considerado las dimensiones de las celdas. Podemos observar, que como era de

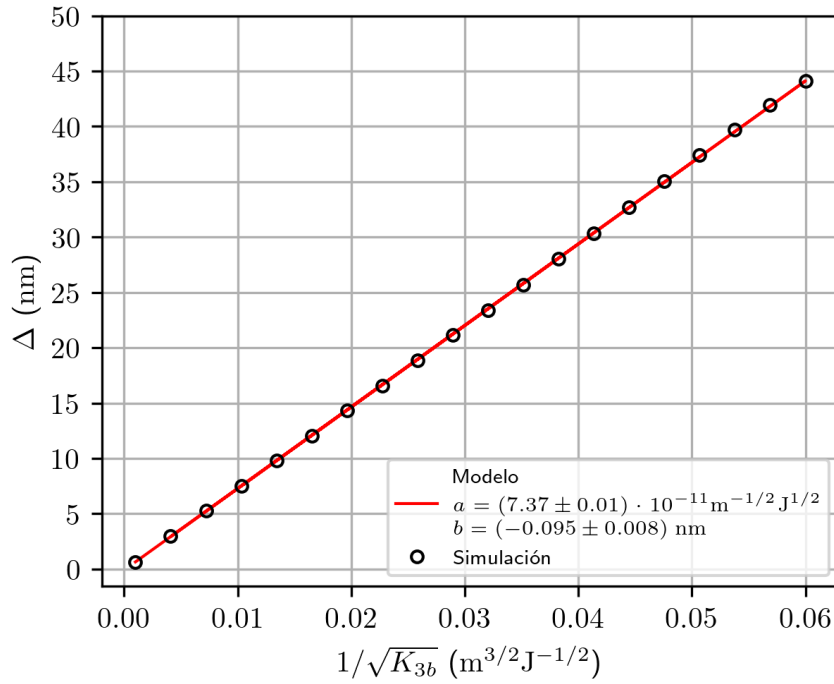


Figura 4.19: Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(K_{3b})^{-1/2}$ para el caso K_{3b} no homogéneo.

esperar, las pendientes son distintas para las paredes de 30° y 60° , siendo menor en el caso de menor ángulo. La relación para las pendientes en cada tipo de pared es

$$\left(\frac{a^{60^\circ}}{a^{30^\circ}} \right)_{anis} = 1,1313$$

Esta diferencia es debida únicamente al tipo de pared, ya que el resto de parámetros y en particular, los valores de A_{11} y A_{12} se han mantenido constantes en todas las simulaciones. Veamos a continuación si la dependencia con las constantes de intercambio prevista por el modelo 3.6 se cumple también.

4.3.3. Dependencia con las constantes de intercambio

Para esta sección se ha utilizado una muestra con las mismas dimensiones que en el apartado anterior: $1024 \text{ nm} \times 128 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ y arista de las celdas de 1 nm . Y los siguientes parámetros son comunes para todas las simulaciones realizadas

$$K_{3b} = \pm 0,5 \text{ MJ/m}^3 \quad B_{12} = -20 \text{ MJ/m}^3$$

$$K_1 = -0,1 \text{ MJ/m}^3, \quad \alpha = 1$$

A la vista del modelo de la ecuación (3.6) se han escogido valores de las constantes de intercambio para obtener datos equiespaciados en $\sqrt{A_{11} - A_{12}/2}$, cada constante tomando valores en el rango de 1 a 100 pJ/m . Al igual que antes, se han realizado ajustes para muestras con anisotropía hexagonal homogénea y no homogénea. Los resultados de dichos ajustes se pueden ver en las figuras 4.20 y 4.21, confirmando que el modelo también predice la dependencia con A_{ij} . Las ordenadas en el origen son de dos órdenes de magnitud menos que 1 nm , y las vamos

a obviar como en el estudio anterior. Las pendientes obtenidas en el ajuste lineal son

$$a^{60^\circ} = (1,05427 \pm 0,00002) \cdot 10^{-3} \text{ m}^{3/2} \text{ J}^{-1/2}$$

$$a^{30^\circ} = (0,9261 \pm 0,0007) \cdot 10^{-3} \text{ m}^{3/2} \text{ J}^{-1/2}$$

Donde de nuevo las incertidumbres mostradas reflejan únicamente la desviación de los datos. Y al igual que antes hay una ligera discrepancia entre la anchura de las paredes de 30° y 60° . Dividiendo las pendientes obtenemos

$$\left(\frac{a^{60^\circ}}{a^{30^\circ}} \right)_{exch} = 1,1384$$

que es, a excepción de unas milésimas, igual al valor obtenido dividiendo las pendientes en el caso anterior. Por lo tanto, existe un factor que modifica el ancho en función del tipo de pared, pero el resto de dependencias consideradas (K_{3b} y A_{ij}) se describen satisfactoriamente con la expresión (3.6).

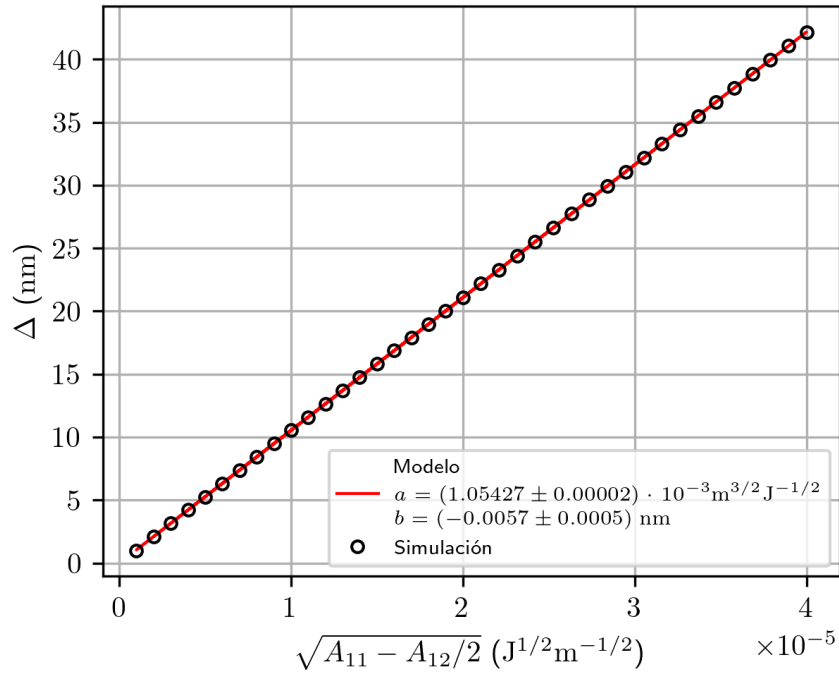


Figura 4.20: Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(A_{11} - A_{12}/2)^{1/2}$ para el caso K_{3b} homogéneo.

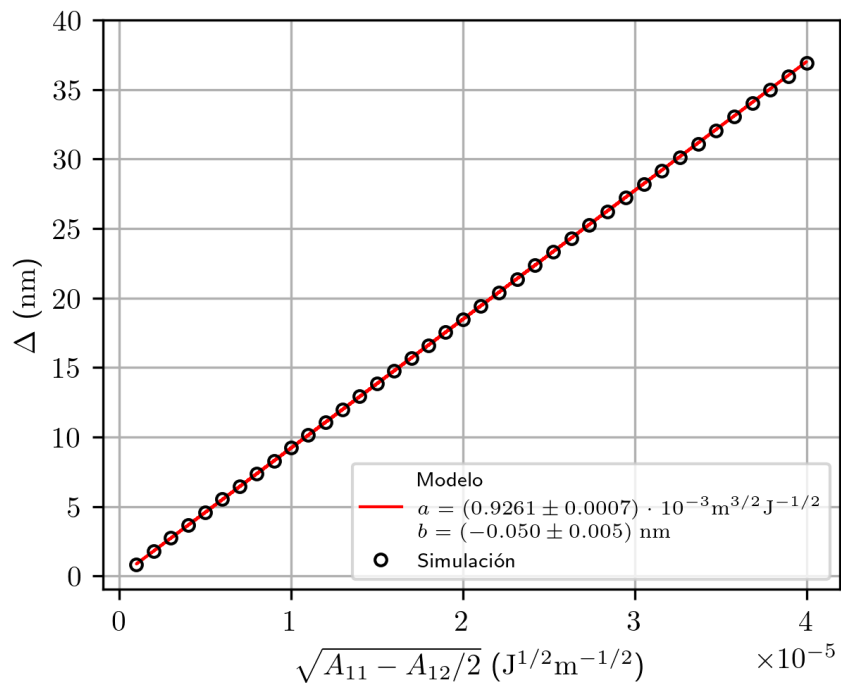


Figura 4.21: Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(A_{11} - A_{12}/2)^{1/2}$ para el caso K_{3b} no homogéneo.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado los estados de equilibrio y las paredes magnéticas entre los mismos en materiales antiferromagnéticos no colineales. Estos materiales tienen interés fundamental tanto como tecnológico. Este tipo de orden magnético puede presentar fenómenos nuevos distintos de otros materiales antiferromagnéticos, y de utilidad tecnológica. En particular, su respuesta magnetoresistiva, aún a pesar de su nula magnetización neta, su dinámica ultrarrápida y la posibilidad de soportar corrientes puras de spin, sin transporte neto de carga, los hace candidatos prometedores para el desarrollo de nuevos dispositivos rápidos y energéticamente eficientes compatibles con la actual electrónica CMOS. Para describir cuantitativamente un material de estas características hemos partido de la teoría micromagnética para el ferromagnetismo y antiferromagnetismo, y la hemos adaptado a estos sistemas incluyendo tres subredes magnéticas equivalentes y acopladas, cada una de ellas regida por la ecuación LLG (2.10). Dicho acople viene dado por la interacción de intercambio, que es el origen cuántico del magnetismo. Después de desarrollar la teoría microscópica hemos adaptado las expresiones para trabajar en la escala micromagnética. Debido a las tres subredes hemos modificado las expresiones de los campos efectivos utilizados en AFM para tener en cuenta el intercambio, añadiendo términos que median las nuevas interacciones. Teniendo en cuenta la interacción de anisotropía magnetocristalina hexagonal en un sistema con tres subredes, ya que es la compatible con la simetría de los AFNC.

Una vez propuestas todas las expresiones que rigen la dinámica del sistema, hemos utilizado una versión modificada de mumax³ para resolverlas numéricamente. En primer lugar hemos estudiado los estados uniformes posibles en estos sistemas, teniendo en cuenta una anisotropía hexagonal. Existe un eje que puede ser fácil o difícil como en la anisotropía uniaxial además de 12 direcciones privilegiadas en el plano basal, 6 direcciones fáciles y 6 difíciles, conformando dos conjuntos idénticos rotados 30° uno respecto del otro. El carácter fácil o difícil de cada uno de los conjuntos depende del signo de la constante K_{3b} .

Hemos pasado a analizar los estados no uniformes más sencillos, compuestos por dos regiones de parámetro de orden uniforme y una región de transición entre ambas, es decir, una pared magnética. Se han realizado pruebas ajustando zonas de la muestra con las condiciones iniciales de los estados de equilibrio para ver los perfiles que surgen en la magnetización a lo largo del eje x al enfrentarlas. Los resultados obtenidos indican que sólo se pueden dar dos tipos básicos de DW en nuestro sistema, las que separan estados 60° y 30°, observando que las transiciones entre estados cuyas direcciones difieren más que estos ángulos vienen mediadas por estas dos paredes básicas. El primer tipo se da únicamente en zonas con anisotropía homogénea y el segundo en el límite entre zonas con anisotropía de distinto tipo cambiando entonces las direcciones fáciles.

A continuación hemos ajustado los perfiles de las DW de acuerdo con el modelo propuesto (3.2) comprobado que las paredes pueden ajustarse con el perfil propuesto, lo que nos permite obtener un parámetro de anchura de la pared. Como se determinó que todas las transiciones están compuestas por dos tipos de paredes, se dividieron todos los perfiles obtenidos en sus DW intermedias. Con todas las DW separadas, se realizó el ajuste para todos los casos y concluimos que la anchura de las paredes de cada tipo, para las mismas constantes de anisotropía e intercambio, son equivalentes entre sí. No obstante, se observa que las paredes de 60° son más anchas que las de 30° . Este resultado era esperable si consideramos que la pared surge como balance de la energía de anisotropía e intercambio. Siendo la anisotropía una densidad de energía local, su contribución a la (anchura de) la pared dependerá de la desviación de la magnetización de la pared respecto de la dirección del eje fácil, dependiendo esta del tipo de pared. Además, la densidad de energía de intercambio es no local y dependerá del gradiente de la magnetización, siendo mayor cuanto mayor sea el ángulo entre la magnetización de celdas adyacentes. Por tanto, para mantener la misma relación entre las densidades de energía de intercambio y anisotropía, es preciso que el ángulo de giro de una celda a la siguiente se ajuste convenientemente. Dado que en ambos casos la dependencia de la energía con el ángulo de la dirección de la subred varía de forma no lineal, no resulta evidente cómo debe ser la dependencia de la anchura de la pared con el ángulo total girado. En cualquier caso, si el ángulo total de giro que tiene que producirse de un dominio a otro es mayor, entonces tendrá que producirse en una anchura mayor.

Finalmente para realizar un estudio más sistemático de la anchura de la pared, se simulieron únicamente paredes simples, de 60° y 30° . De las anchuras medidas para estas paredes simples aprendimos que, en igualdad de constantes de anisotropía e intercambio, las correspondientes a 60° son 1,13 veces más anchas que las de 30° . A continuación se ajustaron estas dos paredes para numerosos valores de K_{3b} y A_{12} , comprobando así que el modelo (3.6), que se adaptó de AFM, da las dependencias correctas de la anchura de la DW con dichas constantes. Queda pendiente para futuros trabajos analizar de forma cualitativa la relación entre la rotación total de la pared y el factor de proporcionalidad en la expresión (3.5).

Apéndice A

Lista de acrónimos

FM Ferromagnético	2
FiM Ferrimagnético	2
AFM Antiferromagnético	2
AFNC Antiferromagnético No Colineal	2
LLG Landau-Lifshitz-Gilbert	7
GPU Graphical Processing Unit	4
DW Domain Wall	16
STT Transferencia de Torque de Espín	2
TMR Magnetoresistencia de efecto Túnel	2

Índice de figuras

1.1. Esquema de las subredes para los casos FM, AFM y FiM. Extraído de [6]. . .	4
1.2. Red cristalina de tipo Kagome formada por tres tipos de subredes, representadas por los átomos circulares rellenos, circulares vacíos y cuadrados vacíos. Extraído de [9]	5
2.1. Superficies de energía para distintos signos de las constantes de anisotropía. Las unidades son arbitrarias y la proporción para las constantes es $K_{3b}/K_1 = 0,2$	11
2.2. Esquema de las constantes de intercambio. La constante A_{11} conecta las magnetizaciones de la primera subred entre celdas vecinas, A_{23} conecta las magnetizaciones de las subredes 2 y 3 entre celdas vecinas. Y la constante B_{13} conecta las magnetizaciones de la primera y tercera subred dentro de la misma celda computacional.	12
3.1. Esquema de la fila de celdas considerada para el estudio de paredes.	15
3.2. Esquema de un sistema genérico y definiciones de ϑ y φ para la magnetización de la primera subred.	16
3.3. Nuevo perfil propuesto para estudiar las DW.	17
4.1. Cortes en el plano xy a las superficies de energía $K_1 < 0$ para valores positivos y negativos de K_{3b} . En esta superficie, mínimos indican direcciones fáciles. . .	19
4.2. Representación vectorial del promedio espacial de las magnetizaciones en el estado final.	20
4.3. Evolución temporal del ángulo azimutal de la magnetización $\vec{m}_1$ para simulaciones con estados iniciales aleatorios.	20
4.4. Nomenclatura de la posición de la magnetización $\vec{m}_1$ para los estados fáciles de la anisotropía hexagonal.	21
4.5. Ángulos acimutales para las tres magnetizaciones en la fila central. Perfil $1^+ - 2^+$. . .	23
4.6. Perfiles de las paredes múltiples.	23
4.7. Perfiles de las paredes inversas.	24
4.8. Ejemplos de paredes en el caso homogéneo con $K_{3b} < 0$. Las texturas obtenidas son las mismas pero desplazadas 30°	24
4.9. Perfiles de las paredes simples para muestra no homogénea.	25
4.10. Perfiles de las paredes $1^+ - 2^-$	26

4.11. Perfil $1^+ - 3^-$ simétrico.	27
4.12. Perfiles de las paredes $1^+ - 3^-$ asimétricos.	27
4.13. Curvas de φ y curvas proporcionales a sus gradientes en x	28
4.14. Ejemplos de ajustes de paredes individuales extraídas de un perfil $1^+ - 4^+$. En los límites de la pared se aprecia el punto de corte de los datos reales, el lado izquierdo para (b) y ambos lados en (a).	29
4.15. Valores medios de Δ y sus errores estándar para todas las paredes individuales en cada perfil posible. En púrpura se han marcado los casos que más se desvían del valor medido para una pared simple.	29
4.16. Perfiles con tres paredes separadas.	30
4.17. Valores medios de Δ para los casos problemáticos con mayor separación entre paredes.	30
4.18. Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(K_{3b})^{-1/2}$ para el caso K_{3b} homogéneo.	31
4.19. Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(K_{3b})^{-1/2}$ para el caso K_{3b} no homogéneo.	32
4.20. Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(A_{11} - A_{12}/2)^{1/2}$ para el caso K_{3b} homogéneo.	33
4.21. Ajuste lineal del parámetro Δ medido en las simulaciones con respecto de $(A_{11} - A_{12}/2)^{1/2}$ para el caso K_{3b} no homogéneo.	34

Bibliografía

- [1] M. N. Baibich et al. “Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices”. En: *Phys. Rev. Lett.* 61 (21 nov. de 1988), págs. 2472-2475. DOI: [10.1103/PhysRevLett.61.2472](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2472). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2472>.
- [2] Hua Chen, Qian Niu y A. H. MacDonald. “Anomalous Hall Effect Arising from Non-collinear Antiferromagnetism”. En: *Phys. Rev. Lett.* 112 (1 ene. de 2014), pág. 017205. DOI: [10.1103/PhysRevLett.112.017205](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.017205). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.017205>.
- [3] M.-T. Suzuki et al. “Cluster multipole theory for anomalous Hall effect in antiferromagnets”. En: *Phys. Rev. B* 95 (9 mar. de 2017), pág. 094406. DOI: [10.1103/PhysRevB.95.094406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.094406). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.094406>.
- [4] J. Zemen, Z. Gercsi y K. G. Sandeman. “Piezomagnetism as a counterpart of the magnetovolume effect in magnetically frustrated Mn-based antiperovskite nitrides”. En: *Phys. Rev. B* 96 (2 jul. de 2017), pág. 024451. DOI: [10.1103/PhysRevB.96.024451](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.024451). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.024451>.
- [5] P. Châtel. *Quantum Magnetism: An Introduction*. <https://magnetism.eu/esm/2009/abs/chatel-abs2.pdf>. European School on Magnetism, Cluj-Napoca, Romania. 2009.
- [6] Sergio Ricardo De Lazaro, Luis Henrique Da Silveira Lacerda y Renan Augusto Pontes Ribeiro. “Magnetic Ordering in Ilmenites and Corundum-Ordered Structures”. En: *Density Functional Theory*. Ed. por Daniel Glossman-Mitnik. Rijeka: IntechOpen, 2019. Cap. 6. DOI: [10.5772/intechopen.81772](https://doi.org/10.5772/intechopen.81772). URL: <https://doi.org/10.5772/intechopen.81772>.
- [7] Claas Willem Abert. “Discrete Mathematical Concepts in Micromagnetic Computations: Novel Numerical Methods for Micromagnetic Equations”. Advisor: Prof. Dr. Michael Hinze. PhD thesis. Hamburg, Germany: University of Hamburg, 2013. Cap. 2. URL: <https://ediss.sub.uni-hamburg.de/handle/ediss/5161>.
- [8] S. Dasgupta y O. Tchernyshyov. “Theory of spin waves in a hexagonal antiferromagnet”. En: *Phys. Rev. B* 102 (14 oct. de 2020), pág. 144417. DOI: [10.1103/PhysRevB.102.144417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.144417). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.144417>.
- [9] M. Semjan y M. Žukovič. “Magnetocaloric Properties of an Ising Antiferromagnet on a Kagome Lattice”. En: *Acta Physica Polonica A* 137.5 (mayo de 2020), págs. 622-624. ISSN: 0587-4246. DOI: [10.12693/aphyspola.137.622](https://doi.org/10.12693/aphyspola.137.622). URL: <http://dx.doi.org/10.12693/APHysPolA.137.622>.
- [10] David Jeffrey Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. eng. 4th. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. ISBN: 978-1-108-42041-9.
- [11] Herbert Goldstein y Julián Fernandez Ferrer. *Mecánica clásica*. spa. Barcelona, (etc): Reverté, 2010. ISBN: 978-84-291-4306-5.

-
- [12] Luis Sánchez-Tejerina San José. “Modelización de nanodispositivos magnéticos con especial énfasis en los fenómenos de acoplamiento espin-órbita”. Tesis doct. 2018.
- [13] J. M. D. Coey. *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, 2010.
- [14] Avner Friedman. “Micromagnetics”. En: *Mathematics in Industrial Problems: Part 5*. New York, NY: Springer New York, 1992, págs. 182-192. ISBN: 978-1-4615-7405-7. DOI: [10.1007/978-1-4615-7405-7_17](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-7405-7_17). URL: https://doi.org/10.1007/978-1-4615-7405-7_17.
- [15] Lev Davidovich Landau y E.M. Lifshitz. *Curso de física teórica. 8, Electrodinámica de los medios continuos*. spa. Barcelona: Reverté, 1975. ISBN: 8429140891.
- [16] Yuta Yamane, Olena Gomonyay y Jairo Sinova. “Dynamics of noncollinear antiferromagnetic textures driven by spin current injection”. En: *Phys. Rev. B* 100 (5 ago. de 2019), pág. 054415. DOI: [10.1103/PhysRevB.100.054415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.054415). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.054415>.
- [17] Luis Sánchez-Tejerina et al. “Dynamics of domain-wall motion driven by spin-orbit torque in antiferromagnets”. En: *Phys. Rev. B* 101 (1 ene. de 2020), pág. 014433. DOI: [10.1103/PhysRevB.101.014433](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.014433). URL: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2501.16523>.
- [18] Arne Vansteenkiste et al. “The design and verification of MuMax3”. En: *AIP Advances* 4.10 (oct. de 2014), pág. 107133. ISSN: 2158-3226. DOI: [10.1063/1.4899186](https://doi.org/10.1063/1.4899186). eprint: https://pubs.aip.org/aip/adv/article-pdf/doi/10.1063/1.4899186/12878560/107133_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4899186>.
- [19] Víctor Costilla. *Documentación MuMax3 AFNC*. 2025. URL: <https://ribtaur.github.io/3/manual.pdf>.
- [20] William H. Press. *Numerical recipes : the art of scientific computing*. eng. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-88068-8.
- [21] MuMax. *MuMax3 API Documentation*. <https://mumax.github.io/api.html>. Accessed: 2025-06-12.
- [22] National Institute of Standards and Technology. *OOMMF User’s Guide – OVF File Format (Version 2.0b0)*. 2020. URL: https://math.nist.gov/oommf/doc/userguide20b0/userguidexml/sec_ovfformat.html.
- [23] Víctor Costilla. *afnc_tools: Analysis tools for MuMax3 AFNC simulations*. Accessed: 2025-06-14. 2025. URL: https://github.com/ribtaur/afnc_tools.
- [24] N. L. Schryer y L. R. Walker. “The motion of 180° domain walls in uniform dc magnetic fields”. En: *Journal of Applied Physics* 45.12 (dic. de 1974), págs. 5406-5421. ISSN: 0021-8979. DOI: [10.1063/1.1663252](https://doi.org/10.1063/1.1663252). eprint: https://pubs.aip.org/aip/jap/article-pdf/45/12/5406/18369378/5406_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1663252>.
- [25] Takayuki Shiino et al. “Antiferromagnetic Domain Wall Motion Driven by Spin-Orbit Torques”. En: *Phys. Rev. Lett.* 117 (8 ago. de 2016), pág. 087203. DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.087203](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.087203). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.117.087203>.
- [26] SciPy Community. *scipy.optimize.curve_fit — SciPy v1.11.3 Manual*. Accessed: 2025-06-14. 2023. URL: https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.curve_fit.html.
- [27] Gerard Salvat-Vallverdú. *Curve fitting with Python*. Accessed: 2025-06-14. URL: https://gsalvatovallverdu.gitlab.io/python/curve_fit/.