

# PROPIEDADES CUASI-ESTÁTICAS DE NANOESTRUCTURAS UNIDIMENSIONALES DE PERMALLOY: UN ANÁLISIS COMPARATIVO EN FUNCIÓN DE PARÁMETROS GEOMÉTRICOS

## QUASI-STATIC PROPERTIES OF ONE-DIMENSIONAL PERMALLOY NANOSTRUCTURES: A COMPARATIVE ANALYSIS AS A FUNCTION OF GEOMETRICAL PARAMETERS

S. Levis<sup>1</sup>, A. Villegas<sup>1</sup>, J. Escrig<sup>2,3</sup>, N. Bajales Luna<sup>1,4</sup> y D. M. Arciniegas Jaimes<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional de Córdoba, FaMAF, Av. Medina Allende s/n, 5000, Córdoba, Argentina.

<sup>2</sup>Universidad de Santiago de Chile, Dpto. de Física, 9170124, Santiago, Chile.

<sup>3</sup>CEDEENNA, 9170124, Santiago, Chile.

<sup>4</sup>CONICET, IFEG, Av. Medina Allende s/n, 5000, Córdoba, Argentina.

Recibido: 28/10/2021 ; Aceptado: 06/12/2021

En el presente estudio se describen las propiedades magnéticas de nanohilos y nanotubos de Permalloy a través de simulaciones micromagnéticas. Estas propiedades son evaluadas en función de los diámetros externos de tales nanoestructuras unidimensionales cuando el campo magnético aplicado es paralelo y perpendicular al eje fácil de las mismas. Además se varió el diámetro de las nanoestructuras con el objeto de discutir las similitudes y diferencias en las propiedades magnéticas como función de su longitud.

*Palabras Clave:* nanotubos, nanohilos, Permalloy, simulaciones micromagnéticas, curvas de histéresis, modos de reversión de la magnetización.

The present study describes the magnetic properties of nanotubes and nanowires of Permalloy through micromagnetic simulations. These properties are evaluated as a function of the external diameters of such one-dimensional nanostructures when the magnetic field applied is parallel and perpendicular to the easy axis of the nanostructures. In addition, the diameter of the nanostructures was also varied in order to discuss the similarities and differences in the magnetic properties as a function of their length.

*Keywords:* nanotubes, nanowires, Permalloy, micromagnetic simulations, hysteresis curves, magnetization reversion modes.

<https://doi.org/10.31527/analesafa.2022.33.2.31>



ISSN 1850-1168 (online)

### I. INTRODUCCIÓN

Las nanoestructuras magnéticas unidimensionales, como nanohilos (NHs) y nanotubos (NTs), se caracterizan por tener una gran relación de aspecto y área superficial, por lo que estas estructuras a escala nanométrica adquieren propiedades magnéticas distintas a las que se observan a gran escala [1, 2]. Esto les otorga características únicas de interés para potenciales aplicaciones tecnológicas. En biomedicina, por ejemplo, estas nanoestructuras se utilizan como agentes de dispersión para la obtención de imágenes mediante resonancia magnética [3, 4] o también en suministro de fármacos [5], tecnología de la información para el desarrollo de memorias espintrónicas de estado sólido [6, 7], entre otras. Las nanoestructuras magnéticas pueden estar constituidas por varios materiales. Entre las aleaciones más prometedoras para aplicaciones tecnológicas se encuentra el Permalloy (Py) [8, 9], un material ferromagnético blando, el cual está compuesto en un 80 % por níquel y en un 20 % por hierro.

Los NHs pueden ser caracterizados a través de su diámetro externo ( $d = 2R$ ) y su longitud ( $L$ ), mientras que los NTs

exhiben un parámetro adicional que es el espesor de la pared del tubo ( $d_w$ ), tal y como puede observarse en la Fig. 1. Al aplicar un campo magnético externo en direcciones paralela y perpendicular al eje fácil ( $z$ ) de las nanoestructuras (Fig. 1), es posible observar ciertos cambios en sus propiedades magnéticas, variando la magnetización de remanencia ( $M_r$ ), la coercitividad ( $H_c$ ) y la magnetización de saturación ( $M_s$ ). También, pueden estudiarse los distintos modos de reversión de la magnetización, la cual puede darse mediante rotación coherente de los momentos magnéticos o a través de la nucleación y propagación de paredes de dominio [10]. Los más usuales para nanoestructuras cilíndricas son: coherente (C), transversal (T) y vórtice (V). Así mismo, recientemente se ha encontrado el modo wave (W) para nanotubos con ciertos parámetros geométricos y para la situación en la cual el campo magnético externo se aplica de manera perpendicular al eje  $z$ . Estos modos de reversión se observan en la Fig. 2 [11, 12]. También se encuentra en la literatura el modo pseudo-coherente, en el cual casi todos los momentos magnéticos revierten de forma coherente [11]. Estos modos de reversión dependen del ángulo de aplicación del campo magnético externo con respecto al eje fácil y, además, del tipo y variables geométricas de las nanoestructuras.

\* diana.arciniegas@unc.edu.ar

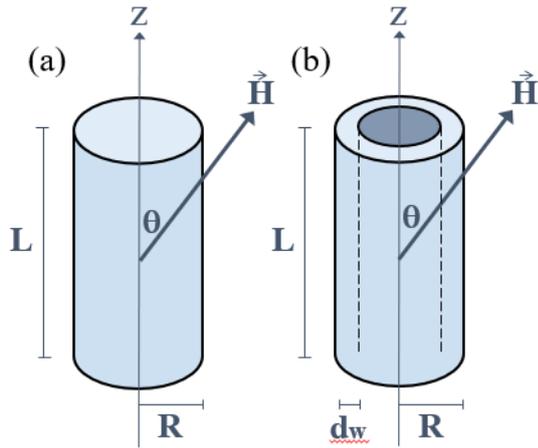


FIG. 1: Parámetros geométricos de (a) un NH y (b) un NT, donde  $L$  es la longitud,  $R$  el radio externo,  $d_w$  es el espesor de pared,  $\vec{H}$  el campo magnético externo aplicado y  $\theta$  el ángulo entre  $\vec{H}$  y el eje de fácil magnetización ( $z$ ).

Consecuentemente, resulta interesante estudiar cómo influyen en las propiedades magnéticas cuasi-estáticas, tanto el tipo de nanoestructura como sus parámetros geométricos, con el fin de controlar sus comportamientos en potenciales aplicaciones. Es por ello que las simulaciones micromagnéticas constituyen una herramienta fundamental para describir, predecir y comprender el efecto de cada factor en las propiedades magnéticas.

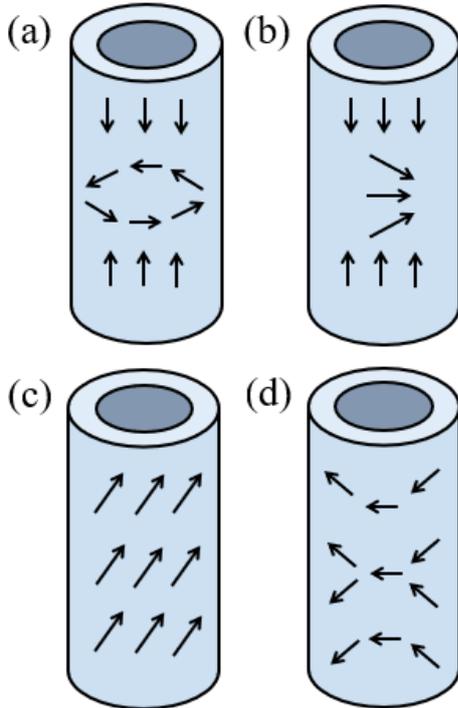


FIG. 2: Esquema de los distintos modos de reversión de la magnetización en sistemas cilíndricos: pared de dominio tipo (a) vórtice y (b) transversal, (c) rotación coherente, y (d) reversión tipo wave.

En este trabajo, se presentan los resultados obtenidos de simulaciones micromagnéticas de un NH y de un NT de Permalloy de  $10 \mu\text{m}$  de longitud en función de sus diámetros externos, cuando se aplica un campo magnético externo en la dirección paralela y perpendicular al eje de fácil mag-

netización de estas nanoestructuras. Además, se discute en forma comparativa estos resultados con los obtenidos para nanoestructuras análogas de menor longitud, simuladas bajo las mismas condiciones.

## II. SIMULACIONES MICROMAGNÉTICAS

La ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) describe la evolución de la magnetización con respecto al tiempo [13]

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma\vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s}\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \quad (1)$$

donde  $\vec{M}$  es la magnetización,  $M_s$  es la magnetización de saturación,  $\gamma$  es la razón giromagnética,  $\alpha$  es el coeficiente de amortiguamiento y  $\vec{H}_{eff}$  es el campo magnético efectivo que incluye el campo magnético externo, el de desmagnetización, el de anisotropía y el de intercambio [14].

Las simulaciones micromagnéticas fueron realizadas utilizando el software libre Object Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF) [15], el cual resuelve la ecuación de LLG de forma iterativa para cada celda de una malla seleccionada.

Se estudiaron las propiedades magnéticas de dos configuraciones, un NT y un NH de Py, con diámetros externos  $d = 40 \text{ nm}$  y  $60 \text{ nm}$  y con  $L = 10 \mu\text{m}$ ; en particular, para el NT se utilizó un  $d_w = 14 \text{ nm}$ . La constante de intercambio para el Permalloy fue  $A_{py} = 13 \times 10^{-12} \text{ J/m}$ , la magnetización de saturación  $M_{s_{py}} = 800 \times 10^3 \text{ A/m}$  y el coeficiente de amortiguamiento,  $\alpha$ , igual a 0,5 [12, 16]. Las nanoestructuras se consideraron policristalinas, por lo que se despreció la anisotropía magnetocristalina [10]. Todas las nanoestructuras se discretizaron tomando en consideración un tamaño de celda de  $2 \times 2 \times 10 \text{ nm}^3$ . Dado que se simulaban NHs y NTs muy largos, se eligió un tamaño de celda suficientemente grande a lo largo del eje fácil ( $z$ ) para completar las simulaciones en un tiempo razonable, pero lo suficientemente pequeño en el plano  $xy$ , con valores menores que su longitud de intercambio ( $5.3 \text{ nm}$ ) para reproducir la geometría cilíndrica de estas nanoestructuras. Este criterio de discretización ha sido elaborado para reducir la rugosidad de los bordes provocada por la simulación de un cilindro con celdas cúbicas.

Con el fin de observar la variación de las propiedades magnéticas de las nanoestructuras estudiadas en función del campo magnético externo,  $H$ , se aplicó éste en la dirección paralela y perpendicular al eje de fácil magnetización de estas nanoestructuras, es decir, con  $\theta = 0^\circ$  y  $\theta = 90^\circ$  respectivamente, como se observa en la Fig. 1.

## III. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En las Figs. 3 y 4 se visualizan las diferentes curvas de histéresis para los NHs y NTs simulados, respectivamente, en donde la magnetización se encuentra normalizada a la magnetización de saturación.

Se observa una marcada cuadratura para  $\theta = 0^\circ$ , lo que indica que esta es la dirección de fácil magnetización. Esto significa que, si el campo magnético aplicado es paralelo al eje fácil, éste debe ser lo suficientemente intenso para revertir la magnetización de la nanoestructura. Por otro lado, a  $\theta = 90^\circ$ , cuando el campo magnético externo es perpen-

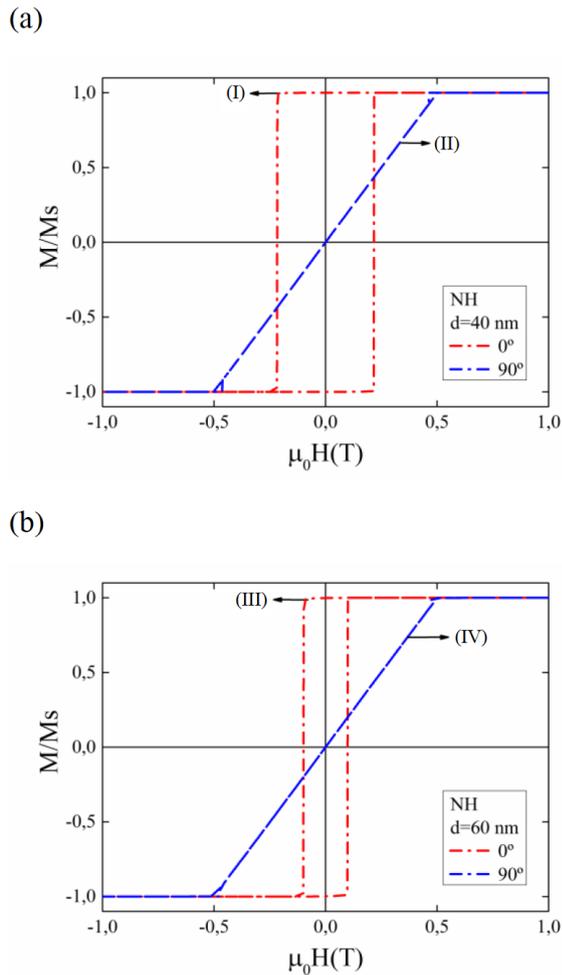


FIG. 3: Curvas de histéresis de NHs de Py bajo la aplicación de un campo magnético externo a  $\theta = 0^\circ$  y  $\theta = 90^\circ$ . NH con diámetro externo de (a) 40 nm y (b) 60 nm.

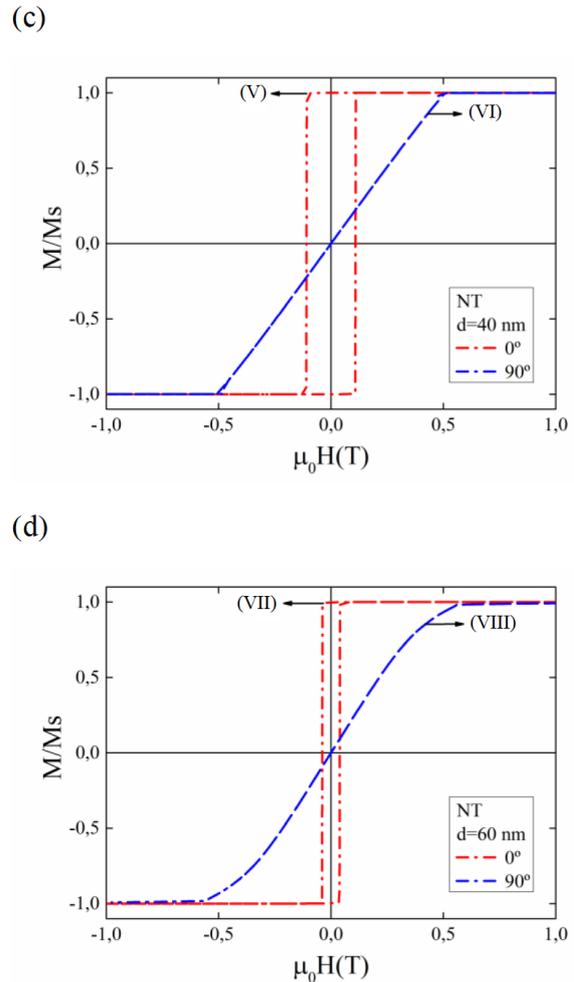


FIG. 4: Curvas de histéresis de NTs de Py bajo la aplicación de un campo magnético externo a  $\theta = 0^\circ$  y  $\theta = 90^\circ$ . NT con diámetro externo de (c) 40 nm y (d) 60 nm.

dicular al eje de fácil magnetización, se observa un comportamiento con coercitividad nula, permitiendo visualizar un cambio significativo de las propiedades magnéticas con respecto al campo magnético externo. Por ello, un análisis comparativo de las coercitividades de ambos sistemas (Tablas 1 y 2) indica que es necesario una mayor intensidad de campo magnético externo a  $\theta = 0^\circ$  que a  $\theta = 90^\circ$  para llevar la imanación a cero. Este comportamiento se debe a la gran anisotropía de forma de estas nanoestructuras, independientemente de si es un NH o un NT. De la misma manera, la remanencia de ambas estructuras es mayor para  $\theta = 0^\circ$  que la observada para  $\theta = 90^\circ$  [17].

Por otro lado, se observa que para un diámetro mayor de NH (o NT), el campo coercitivo disminuye (ver Tablas 1 y 2). Esto se debe a que la interacción dipolar interna se vuelve más importante, produciendo dominios de cierre [10, 18]. Tal efecto facilita la nucleación y propagación de las paredes de dominio, dando lugar a una menor coercitividad. Un análisis comparativo entre ambas nanoestructuras evidencia que la coercitividad es mayor en un NH que en un NT. Este resultado se interpreta en función de que es más sencillo nuclear una pared de vórtice en los extremos de un NT que en los de un NH, por lo que se necesita un cam-

po magnético menor para nuclear y propagar las paredes de dominio, responsables del proceso de reversión de la magnetización en estas nanoestructuras que tienen una relación de aspecto importante.

Asimismo, se han señalado en las Figs. 3 y 4 algunos puntos correspondientes a instantáneas de la magnetización, para los cuales pueden observarse los diferentes modos de reversión para ambas estructuras y diámetros estudiados, en función de la dirección de campo aplicado con respecto al eje fácil (Fig. 5 y 6). Para  $\theta = 0^\circ$ , la reversión de la magnetización se presenta como la propagación de paredes de dominio tipo vórtice, mientras que para  $\theta = 90^\circ$  se observa una reversión de la magnetización en modo pseudo-coherente. Además, al comparar estos valores para los mismos diámetros en función de la longitud, observamos que los valores de  $M_r/M_s$  y  $H_c$  prácticamente no varían de manera significativa [12, 17] (ver Tablas 1 y 2). Sin embargo, un resultado notable se evidencia para el NT con  $d = 60$  nm y  $\theta = 90^\circ$ . En efecto, se observa un cambio en el modo de reversión, respecto a lo observado para la misma nanoestructura con  $L = 1 \mu\text{m}$  [16]. Así, en estas condiciones, se obtiene que para una longitud más corta ( $1 \mu\text{m}$ ), el NT revierte su magnetización mediante el modo wave, recien-

TABLA 1: Valores de  $H_c$  y  $M_r/M_s$  para un NH con  $L = 10 \mu m$  y  $L = 1 \mu m$

| L          | NH                 |           |                     |           |                    |           |                     |           |
|------------|--------------------|-----------|---------------------|-----------|--------------------|-----------|---------------------|-----------|
|            | d = 40 nm          |           |                     |           | d = 60 nm          |           |                     |           |
|            | $\theta = 0^\circ$ |           | $\theta = 90^\circ$ |           | $\theta = 0^\circ$ |           | $\theta = 90^\circ$ |           |
|            | $\mu_0 H_c$ [T]    | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]     | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]    | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]     | $M_r/M_s$ |
| 10 $\mu m$ | 0,2523             | 0,999     | 0                   | 0         | 0,1056             | 0,999     | 0                   | 0         |
| 1 $\mu m$  | 0,2167             | 0,999     | 0                   | 0         | -                  | -         | -                   | -         |

TABLA 2: Valores de  $H_c$  y  $M_r/M_s$  para un NT con  $L = 10 \mu m$  y  $L = 1 \mu m$

| L          | NT                 |           |                     |           |                    |           |                     |           |
|------------|--------------------|-----------|---------------------|-----------|--------------------|-----------|---------------------|-----------|
|            | d = 40 nm          |           |                     |           | d = 60 nm          |           |                     |           |
|            | $\theta = 0^\circ$ |           | $\theta = 90^\circ$ |           | $\theta = 0^\circ$ |           | $\theta = 90^\circ$ |           |
|            | $\mu_0 H_c$ [T]    | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]     | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]    | $M_r/M_s$ | $\mu_0 H_c$ [T]     | $M_r/M_s$ |
| 10 $\mu m$ | 0,1089             | 0,999     | 0                   | 0         | 0,0389             | 0,997     | 0                   | 0         |
| 1 $\mu m$  | 0,1085             | 0,998     | 0                   | 0         | -                  | -         | 0,009               | 0,4446    |

temente propuesto [12, 16]. Por ello, es importante notar cómo puede cambiar la forma en la que los momentos magnéticos de un material revierten su magnetización de forma distinta influenciada por un factor geométrico como la longitud.

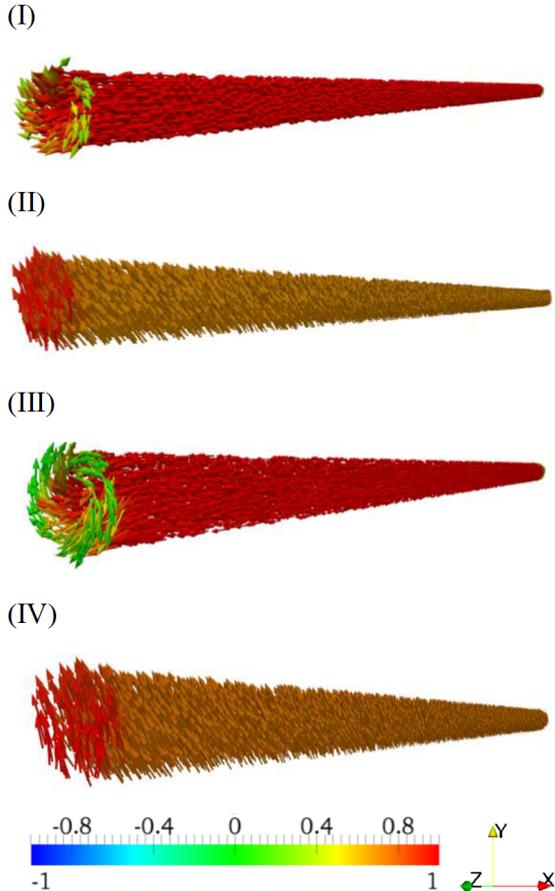


FIG. 5: Modos de reversión para un NH de 40 nm de diámetro con un campo aplicado a: (I)  $\theta = 0^\circ$  y (II)  $\theta = 90^\circ$  y de 60 nm de diámetro con un campo aplicado a: (III)  $\theta = 0^\circ$  y (IV)  $\theta = 90^\circ$ .

#### IV. CONCLUSIONES

Se analizaron en forma comparativa las curvas de histéresis y modos de reversión para un NH y un NT de  $10 \mu m$  de longitud, obtenidos mediante simulaciones micromagnéticas. Se observó que para  $\theta = 0^\circ$ , el proceso de reversión de

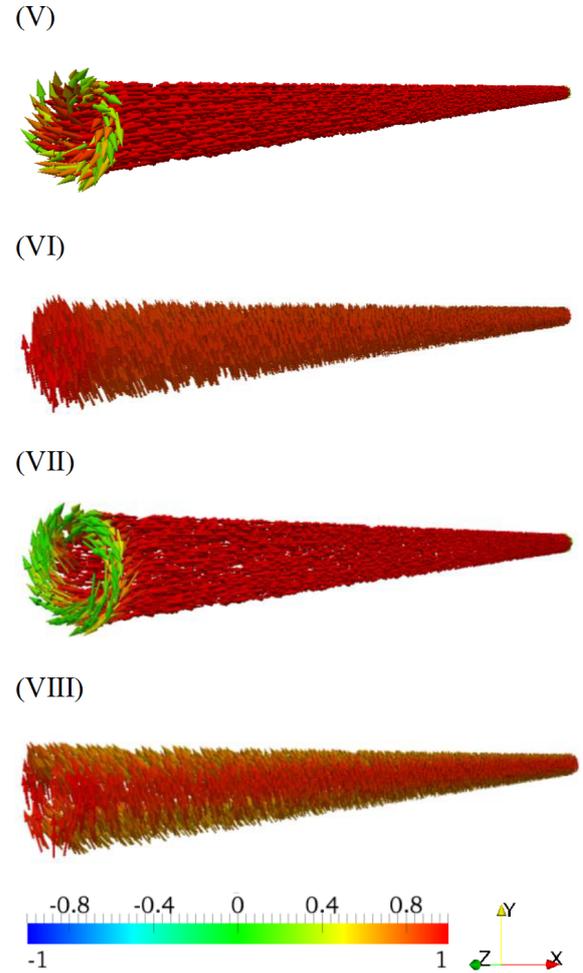


FIG. 6: Modos de reversión para un NT de 40 nm de diámetro con un campo aplicado a: (V)  $\theta = 0^\circ$  y (VI)  $\theta = 90^\circ$  y de 60 nm de diámetro con un campo aplicado a: (VII)  $\theta = 0^\circ$  y (VIII)  $\theta = 90^\circ$ .

la magnetización ocurre mediante la nucleación y propagación de paredes de dominio tipo vórtice, mientras que para  $\theta = 90^\circ$  se identificó el eje de difícil magnetización, con modo de reversión de la magnetización pseudo-coherente. Además, se observó que a un mismo diámetro ( $d = 60 \text{ nm}$ ), pero bajo dos longitudes distintas, la reversión de la magnetización es notablemente diferente cuando el campo externo se aplica de manera perpendicular al eje de fácil magnetiza-

ción.

Los resultados obtenidos nos han permitido describir el efecto de los parámetros geométricos en las propiedades magnéticas de nanoestructuras unidimensionales de Py, lo que evidencia el rol fundamental de tales factores, así como el aporte de las simulaciones al entendimiento del comportamiento de tales nanoestructuras, de interés para el diseño, predicción y control de su conducta magnética en diversas aplicaciones nanotecnológicas.

#### AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Centro de Computación de Alto Desempeño (CCAD) de la UNC, por el acceso al cluster Mendieta.

J.E. agradece a Fondecyt 1200302 y al proyecto Basal AFB180001.

#### CRÉDITOS DE AUTOR

Selene Levis y Angelo Villegas: Investigación del problema. Procesamiento e interpretación de datos. Escritura del primer borrador.

Juan Escrig: Investigación del problema. Interpretación de datos.

Noelia Bajales Luna: Investigación del problema. Diseño y conceptualización. Financiamiento.

Diana Arciniegas Jaimes. Investigación del problema. Diseño y conceptualización. Orientadora del proyecto.

#### REFERENCIAS

- [1] D. Vollath. *Nanomaterials: An Introduction to Synthesis, Properties and Applications* (John Wiley & Sons, 2013).
- [2] K. T. Ramesh. *Nanomaterials: Mechanics and Mechanisms* (Springer US, 2009).
- [3] M. Bañobre-López, C. Bran, C. Rodríguez-Abreu, J. Gallo, M. Vázquez y J. Rivas. A colloidally stable water dispersion of Ni nanowires as an efficient  $T_2$ -MRI contrast agent. *J. Mater. Chem. B* **5**, 3338-3347 (2017).
- [4] V. K. Varadan, L. Chen y J. Xie. en *Nanomedicine* 273-327 (2008).
- [5] L. Zhang, T. Petit, K. E. Peyer y B. J. Nelson. Targeted cargo delivery using a rotating nickel nanowire. *Nanomed.: Nanotechnol. Biol. Med.* **8**, 1074-1080 (2012).
- [6] S. Parkin y S.-H. Yang. Memory on the racetrack. *Nat. Nanotechnol.* **10**, 195-198 (2015).
- [7] S. S. P. Parkin, M. Hayashi y L. Thomas. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. *Science* **320**, 190-194 (2008).
- [8] D. M. Arciniegas James, P. Márquez, A. Ovalle, J. Escrig, O. Linarez Pérez y N. Bajales. Permalloy nanowires/graphene oxide composite with enhanced conductive properties. *Sci. Rep.* **10**, 13742 (2020).
- [9] C. Cheung, P. Nolan y U. Erb. Synthesis of nanocrystalline permalloy. *Mater. Lett.* **20**, 135-138 (1994).
- [10] B. D. Cullity. *Introduction to Magnetic Materials* (Addison-Wesley, Reading, MA., 1972).
- [11] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir y E. E. Vogel. Reversal modes in magnetic nanotubes. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 102501 (2007).
- [12] S. Raviolo, D. M. Arciniegas Jaimes, N. Bajales y J. Escrig. Wave reversal mode: A new magnetization reversal mechanism in magnetic nanotubes. *J. Magn. Magn. Mater.* **497**, 165944 (2020).
- [13] Y. Tserkovnyak, A. Brataas y G. E. W. Bauer. Enhanced Gilbert Damping in Thin Ferromagnetic Films. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 1176011-1176014 (2002).
- [14] Y. Tserkovnyak, A. Brataas y G. E. W. Bauer. Spin pumping and magnetization dynamics in metallic multilayers. *Phys. Rev. B* **66**, 2244031-22440310 (2002).
- [15] M. J. Donahue y D. G. Porter. *OOMMF Users Guide, Version 1.2 a3* urlhttp://math.nist.gov/oommf. 2002.
- [16] D. M. Arciniegas Jaimes, S. Raviolo, J. M. Carballo, N. Bajales y J. Escrig. Wave reversion mode stability as a function of diameter and wall thickness for permalloy and nickel nanotubes. *J. Magn. Magn. Mater.* **523**, 167578 (2021).
- [17] S. Raviolo, F. Tejo, N. Bajales y J. Escrig. Angular dependence of the magnetic properties of permalloy and nickel nanowires as a function of their diameters. *Mater. Res. Express* **5**, 015043 (2018).
- [18] A. Aharoni. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism* (Oxford University Press, 2001).