

San Luis, 12 de septiembre de 2024

Sra. Secretaria Académica

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales

Esp. Mónica Mercedes Daza

S _____ / _____ D

Ref.: Solicitud de inscripción al Trabajo Especial de la Licenciatura en Física.

De mi mayor consideración:

Me dirijo a Ud., y por su intermedio a quien corresponda, con el objeto de solicitarle, en el marco de la OCD-3-12/22, la inscripción al Trabajo Especial de la Licenciatura en Física titulado **“Comportamiento magnético de arreglos ordenados de nano-hilos de Níquel”** bajo la dirección del Dr. Federico José Romá.

A tal efecto, adjunto a la presente el correspondiente Plan de Trabajo.

Declaro conocer el Reglamento del Trabajo Especial de Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales de la UNSL y aceptar cada una de las obligaciones que de él derivan, comprometiéndome formalmente a su cumplimiento en caso de que fuera aprobado el Plan del Trabajo Especial.

Sin otro particular, saludo a la Sra. Secretaria muy atentamente.



Valentina Cecilia Barroso

43.840.133

3001420

.....
Firma y Aclaración

.....
DNI

.....
Registro

Firman en conformidad



Dr. Federico José Romá

.....
Director

Plan de Trabajo Licenciatura en Física

Comportamiento magnético de arreglos ordenados de nano-hilos de Níquel

Apellido, Nombre (estudiante)

Barroso, Valentina Cecilia

DNI:

43.840.133

Director/a:

Romá, Federico José

Codirector/a (si corresponde):

Tutor/a (si corresponde):

Objetivos Generales y Específicos

Objetivo general:

Estudiar el comportamiento magnético de nano-hilos de Níquel interactuantes mediante el uso de simulaciones micro-magnéticas.

Objetivos específicos:

- a- Aprender los fundamentos teóricos básicos sobre micro-magnetismo.
- b- Aprender a realizar códigos básicos en lenguaje C++.
- c- Aprender a resolver numéricamente ecuaciones diferenciales estocásticas.
- d- Realizar simulaciones micro-magnéticas de nano-hilos magnéticos.
- e- Calcular el campo coercitivo de arreglos ordenados de nano-hilos magnéticos.

Introducción

El estudio de los “efectos de tamaño finito”, es decir los cambios que se observan en las propiedades físicas de un sistema cuando sus dimensiones características se hacen muy pequeñas, constituye un campo de investigación muy activo en Materia Condensada. A una escala “mesoscópica”, la cual está situada entre el nivel microscópico gobernado exclusivamente por la física cuántica, y el macroscópico que en gran medida está bien descrito por la física clásica, emergen una gran cantidad de fenómenos de interés tanto para la ciencia básica como la aplicada [1,2]. En este contexto, los materiales magnéticos ocupan un lugar privilegiado debido al gran potencial que tienen en el desarrollo tecnológico actual.

Las posibles aplicaciones tecnológicas de micro o nano-estructuras tales como las nano-partículas, nano-hilos y nano-tubos que son sintetizados a partir de diferentes tipos de materiales, han logrado despertar el interés por investigar y entender en profundidad cómo se comportan realmente estos compuestos. A esta escala, los materiales sólidos adquieren novedosas propiedades magnéticas, de transporte de carga eléctrica, catalíticas, mecánicas y ópticas. Estas características les confieren un potencial de uso tecnológico en una variedad de campos como la nano-electrónica [3,4], magneto-optoelectrónica [5], almacenamiento de datos digitales y sensores [6,7], así como en terapias médicas de, por ejemplo, hipertermia [8].

La investigación científica a nivel mesoscópico presenta innumerables desafíos. En primer lugar, es necesario sintetizar estructuras de tamaños típicos que van de las decenas de nanómetros a las decenas de micrómetros. Esto se logra mediante sofisticadas técnicas, químicas (electro-deposición) o físicas (litografía óptica y ataque iónico), que han sido adaptadas o diseñadas para tal fin [9]. Por ejemplo, en las Figs. 1 (a) y (b) podemos observar dos tipos de membranas cerámica de alúmina que fueron usadas

para sintetizar, mediante electro-deposición, nano-hilos ferromagnéticos de Ni (Níquel) de diferentes tamaños, Figs. 1 (c) y (d) [10].

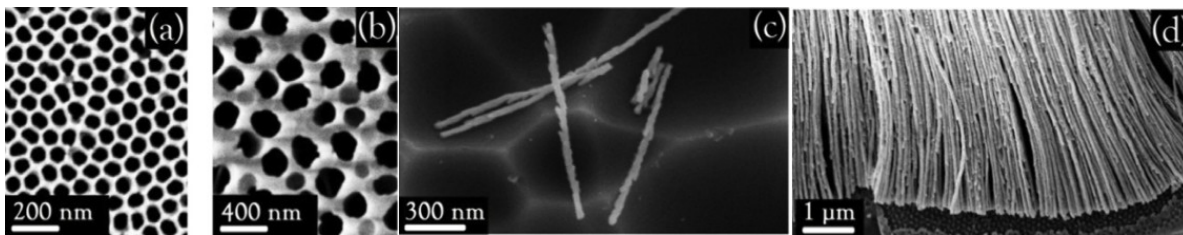


Figura 1: (a) y (b) Membranas de alúmina con diferentes tamaños de poros. (c) y (d) Nano-hilos de Ni de diferentes tamaños [10].

Una vez que son sintetizados estos materiales es necesario medir sus propiedades físicas. Como podemos apreciar en la Fig. 1 (d), los procedimientos de síntesis permiten obtener un gran número de entes. Y en general, como la magnetización (u otra magnitud física) de una única micro-estructura es muy difícil de detectar, se emplean instrumentos comerciales para medir la respuesta magnética de todo este ensamble. De esta forma se obtienen resultados experimentales que sólo dan cuenta del comportamiento colectivo de tales ensambles y no permiten inferir fácilmente las características físicas de sus componentes básicos.

Afortunadamente, en la actualidad es posible realizar experimentos muy precisos en los cuales se aísla una única micro-estructura y se miden sus propiedades físicas individuales usando micro-sensores. Para ello se emplean diferentes instrumentos, algunos de uso estándar como los micro-manipuladores con los cuales es posible seleccionar y mover estas muestras microscópicas, y otros que son diseñados específicamente para medir una propiedad típica de estos sistemas, como los micro-sensores que son fabricados con tecnología MEMS (*Micro Electro Mechanical Systems*).

Siguiendo el ejemplo de los nano-hilos de Ni, en la Fig. 2 podemos apreciar cómo depende el campo coercitivo B_c con la temperatura para este material (en particular, para los nano-hilos denominados DC65 en la Ref. [10]). En términos muy simples, B_c se define como la intensidad del campo magnético que se debe aplicar a un material para reducir su magnetización a cero después de que la muestra fue saturada. La curva negra (círculos abiertos) corresponde a los resultados obtenidos por el grupo de investigación liderado por Dra. Paula Bercoff de FAMAF, Córdoba, quienes además sintetizaron este material.

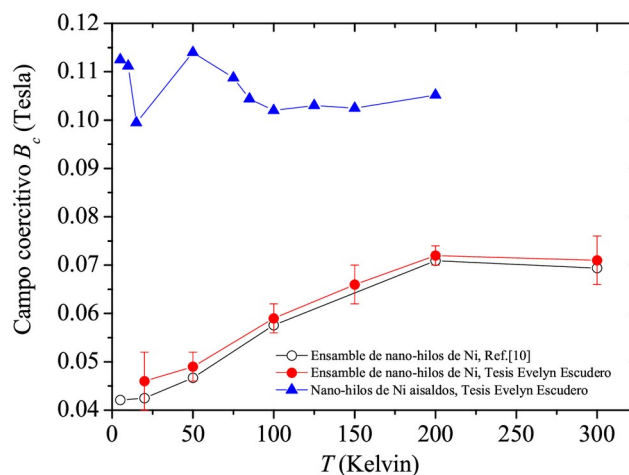


Figura 2: Campo coercitivo versus la temperatura de nano-hilos de Ni.

En este caso, se usó un magnetómetro de vibración para medir los ciclos de histéresis (y de ahí obtener B_c) de muestras compuestas por un gran número de nano-hilos de Ni alineados, aún atrapados en una membrana cerámica de alúmina. Por otro lado, la curva roja (círculos llenos) corresponde a mediciones realizadas en San Luis sobre una muestra macroscópica similar, donde se utilizó un micro-sensor *Hall*. Estos últimos experimentos fueron realizados en el marco de la tesis de Licenciatura en Física de Evelyn Escudero, la cual aún está en desarrollo.

Aunque se emplearon diferentes técnicas experimentales, como era de esperarse las curvas negra y roja en la Fig. 2 coinciden muy bien. Lo sorprendente es que el campo B_c disminuye cuando la temperatura baja, un comportamiento completamente anómalo. Para entender el origen de este fenómeno, actualmente en el laboratorio de San Luis se están realizando mediciones de nano-hilos de Ni aislados usando micro-osciladores mecánicos de silicio. La Fig. 2 muestra los primeros datos que se han obtenido, curva azul (triángulos llenos). La diferencia entre estos nuevos resultados y los medidos anteriormente para empaquetados de nano-hilos es muy evidente. Podemos apreciar que la anomalía en el campo B_c ha desaparecido (en cambio, en la curva azul aparece ahora un comportamiento a bajas temperaturas que se debe a la oxidación de los nano-hilos cuando son expuestos a la atmósfera).

Evidentemente, el comportamiento anómalo de B_c detectado en las muestras macroscópicas (empaquetados de nano-hilos), debería estar originado tanto por las interacciones dipolares que hay entre los nano-hilos de Ni (pues están situados muy próximos unos de otros), como por la interacción de cada uno de ellos con la membrana de alúmina (por un efecto de magnetostricción). En este contexto, es claro que el uso de simulaciones computacionales micro-magnéticas [11,12,13,14] permitiría determinar, cómo cada uno de estos efectos físicos se combinan para producir el comportamiento anómalo del campo coercitivo observado en el material.

En este plan de trabajo se usarán simulaciones micro-magnéticas para calcular el campo coercitivo de arreglos ordenados de nano-hilos de Ni. Se introducirán interacciones dipolares entre nano-hilos, para determinar cómo es la dependencia de B_c con la temperatura y la separación entre estas micro-estructuras. No se considerará por el momento el efecto de magnetostricción producido por la presencia de la membrana de alúmina, un tópico que se estudiará por separado en el futuro.

Metodología

El trabajo central consistirá en calcular los ciclos de histéresis de nano-hilos de Ni realizando simulaciones micro-magnéticas. Aunque este material ha sido exhaustivamente estudiado a nivel experimental, aún persisten interrogantes sobre su comportamiento magnético. En particular, cuando los nano-hilos se encuentran aglomerados y empaquetados en una membrana de alúmina, se observa un comportamiento singular del campo coercitivo (ver Introducción).

Para estudiar este fenómeno, se realizarán códigos en lenguaje de programación C++ para integrar numéricamente la ecuación estocástica de Landau-Lifshitz-Gilbert [11,15], la cual es ampliamente usada para describir la dinámica de un sistema ferromagnético a bajas temperaturas. La alumna comenzará sus actividades académicas estudiando la teoría micro-magnética. Deberá realizar una breve exposición del tema que permitirá comenzar a discutir los detalles del modelo que se usará para describir a un sistema microscópico ferromagnético. Posteriormente, aprenderá los fundamentos básicos de programación en lenguaje C++. Deberá realizar una serie de códigos simples con el objetivo de aprender a efectuar simulaciones micro-magnéticas basadas en la resolución de la ecuación diferencial estocástica de Landau-Lifshitz-Gilbert.

Con estas herramientas deberá simular en primer lugar un nano-hilo de Ni aislado para obtener sus ciclos de histéresis. Se usarán los datos experimentales obtenidos en el grupo (mediciones realizadas con micro-osciladores) para encontrar los parámetros óptimos de simulación. Posteriormente, realizará

simulaciones de arreglos ordenados de nano-hilos interactuantes (con interacciones dipolares), para determinar cómo es la dependencia de B_c con la temperatura y la separación entre estas micro-estructuras.

Finalmente, la alumna redactará la tesis de Licenciatura en Física incluyendo todo lo referente a este estudio: la descripción de los datos experimentales disponibles, los análisis teóricos previos, los métodos de simulación micro-magnética y las simulaciones realizadas de empaquetados de nano-hilos de Ni.

Facilidades y Disponibilidades

El presente plan de trabajo de Licenciatura en Física se desarrollará en el seno del proyecto de investigación de la Universidad Nacional de San Luis, PROICO 03-2220, “Materiales magnéticos desordenados y nano-estructurados de tamaño mesoscópico”. El grupo de investigación se especializa en el estudio experimental y de simulación de sistemas magnéticos microscópicos.

El material bajo estudio, nano-hilos de Ni, fue sintetizado y originalmente estudiado por el grupo de investigación de la Dra. Paula Bercoff de FAMAF, Córdoba. Por otro lado, los experimentos mas recientes han sido realizados en el grupo de San Luis, en especial las mediciones de nano-hilos de Ni aislados. Estos estudios corresponden a la tesis de Licenciatura en Física de Evelyn Escudero, la cual aún está en desarrollo. Por este motivo, se cuenta con toda la información experimental pertinente e incluso con la posibilidad de realizar nuevas mediciones de este sistema.

Adicionalmente, el grupo cuenta con el conocimiento y las herramientas necesarias para efectuar simulaciones micro-magnéticas complejas. En particular, se tiene acceso al *cluster* de computadoras BACO4 que posee 146 nodos de cálculo y cuyo sistema de colas está administrado por un sistema HCcondor.

Cronograma y Factibilidad

El cronograma de trabajo de la alumna es el siguiente:

- Septiembre de 2024: estudiará los fundamentos teóricos básicos sobre micro-magnetismo (tarea actualmente en desarrollo).
- Septiembre/Octubre de 2024: aprenderá a realizar códigos básicos en lenguaje C++ y a resolver numéricamente ecuaciones diferenciales estocásticas (tarea actualmente en desarrollo).
- Noviembre de 2024: realizará simulaciones micro-magnéticas de nano-hilos individuales.
- Diciembre de 2024/Enero de 2025: realizará simulaciones de arreglos de nano-hilos para calcular el campo coercitivo de este sistema.
- Febrero/Marzo de 2025: redactará sus tesis la cual deberá defender antes del 31 de marzo de 2025.

Referencias

- [1] A. C. Basaran *et al.*, Materials Research Society Bulletin **40**, 925 (2015).
- [2] C. P. Poole and F. J. Owens, *Introduction to Nanotechnology* (John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2003).
- [3] D. K. Ferry, Science **319**, 579 (2008).
- [4] W. Zhou, X. Dai, T.-M. Fu, C. Xie, J. Liu, and C. M. Lieber, Nano Lett. **14**, 1614 (2014).
- [5] Q. Liu, X. Zheng, J. He, W. Wang *et al.*, Sci. Rep. **6**, 29170 (2016).
- [6] Y. Ai *et al.*, Adv. Mater. Technol. **1**, 1600142 (2016).
- [7] A. C. Niemann, T. Böhnert, A.-K. Michel *et al.*, Adv. Electron. Mater. **12**, 1600058 (2016).
- [8] T.J. Gutiérrez and V. A. Alvarez, *Nanoparticles for hyperthermia applications*, Handbook of

Nanomaterials for Industrial Applications, Elsevier, 563-576 (2018).

[9] L. Li, L. Liang, H. Wu, and X. Zhu, *Nanoscale Res. Lett.* **11**, 121 (2016).

[10] F. Meneses, S. E. Urreta, J. Escrig, P. G. Bercoff, *Current Applied Physics* **18**, 1240 (2018).

[11] G. Bertotti, I. Mayergoyz, and C. Serpico, *Nonlinear Magnetization Dynamics in Nanosystems* (Elsevier, Amsterdam, 2009).

[12] F. Romá, L. Cugliandolo, and G. Lozano, *Phys. Rev. E* **90**, 023203 (2014).

[13] P. Longone and F. Romá, *Phys. Rev. B* **97**, 214412 (2018).

[14] M. I. Dolz, S. D. Calderón Rivero, H. Pastoriza, and F. Romá. *Phys. Rev. B* **101**, 174425 (2020).

[15] T. L. Gilbert, *Phys. Rev.* **100**, 1243 (1955); T. L. Gilbert, *IEEE Trans. Mag.* **40**, 3443 (2004).



Valentina Cecilia Barroso

.....

Estudiante



Dr. Federico José Romá

.....

Director/a

.....

Codirector/a y/o Tutor/a