



VNiVERSiDAD D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL
Universidad de Salamanca

FACULTAD DE CIENCIAS/DPTO. DE FÍSICA APLICADA

NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS PARA APLICACIONES EN BIOMEDICINA: ESTUDIO TEÓRICO Y SIMULACIONES

Trabajo de Fin de Grado

Autor: Luis Alexander Urgiles Arauz

Tutor: Luis Torres Rincón

2023

Título: “Nanopartículas magnéticas para aplicaciones en biomedicina: estudio teórico y simulaciones”

Autor: Luis Alexander Urgiles Arauz

Tutor: Luis Torres Rincón

Año: 2023

Firma del autor:

Firmado por Luis Alexander Urgiles Arauz el día

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Luis Alexander Urgiles Arauz', is centered within a rectangular box. The signature is written in a cursive style with a large, sweeping flourish at the end.

Certificado de los tutores TFG Grado en Físicas

D. Luis Torres Rincón, profesor del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca.

HACE CONSTAR:

Que el trabajo titulado “*Nanopartículas magnéticas para aplicaciones en biomedicina: trabajo teórico y simulaciones*”, que se presenta, ha sido realizado por D. Luis Alexander Urgiles Arauz, con DNI 73142049-W y constituye la memoria del trabajo realizado para la superación de la asignatura Trabajo de Fin de Grado en Físicas en esta Universidad.

Salamanca, a fecha de firma electrónica.

Fdo.:

Resumen

El Micromagnetismo ha permitido estudiar los procesos de magnetización que ocurren en los materiales magnéticos y que dan lugar a los distintos estados de magnetización posibles. Estos fundamentos pueden aplicarse al desarrollo de partículas magnéticas de tamaño nanométrico para aplicaciones en biomedicina. Las aplicaciones más destacadas en este campo serán expuestas en este trabajo.

Las simulaciones micromagnéticas pretenden resolver las ecuaciones tediosas, mayormente sin solución analítica, del Micromagnetismo, permitiendo entender y predecir el comportamiento de los materiales magnéticos, incluso a escala real. En este trabajo se realizarán simulaciones micromagnéticas con el software Mumax³, y se discutirán los resultados obtenidos.

Palabras clave

- Medios magnéticos
- Momento magnético
- Magnetización
- Magnetostática
- Intercambio
- Anisotropía
- Ley constitutiva
- Histéresis
- Dominio magnético
- Energía libre
- Micromagnetismo
- Ecuaciones de Brown
- Ecuación de Gilbert
- Ecuación de Landau-Lifshitz
- Biomedicina
- Superparamagnetismo
- Mumax³

Abstract

Micromagnetism has allowed us to study the magnetization processes that occur in magnetic materials and that give rise to the different possible magnetization states. These fundamentals can be applied to the development of nanometric-sized magnetic particles for applications in biomedicine. The most notable applications in this field will be presented in this work.

Micromagnetic simulations aim to solve the tedious equations, mostly without analytical solution, of Micromagnetism, allowing us to understand and predict the behavior of magnetic materials, even on a real scale. In this work, micromagnetic simulations will be carried out with the Mumax³ software, and the results obtained will be discussed.

Keywords

- Magnetic media
- Magnetic moment
- Magnetization
- Magnetostatic
- Exchange
- Anisotropy
- Constitutive law
- Hysteresis
- Magnetic domain
- Free energy
- Micromagnetism
- Brown equations
- Gilbert equation
- Landau-Lifshitz equation
- Biomedicine
- Superparamagnetism
- Mumax³

Índice

1. Introducción	1
2. Introducción a la teoría del micromagnetismo	2
2.1. Ecuaciones de Maxwell en Medios Magnéticos	2
2.1.1. Magnetostática	2
2.1.1.1. Ecuaciones de Maxwell	2
2.1.1.2. Corrientes estacionarias	3
2.1.1.3. Momentos magnéticos	4
2.1.2. Medios magnéticos	6
2.1.2.1. Momentos magnéticos y magnetización	6
2.1.2.2. Analogía electrostática	7
2.1.2.3. Campos de desmagnetización	8
2.1.3. Relaciones energéticas	9
2.1.3.1. Energía de distribuciones de corriente estacionarias	9
2.1.3.2. Energía de momentos magnéticos individuales	11
2.1.3.3. Teorema de Poynting	13
2.2. Trabajo magnético y Termodinámica	13
2.2.1. Trabajo magnético y leyes constitutivas	14
2.2.1.1. Cuerpo magnético como un ensamblaje de momentos magnéticos	14
2.2.1.2. Conservación de energía y trabajo magnético	15
2.2.1.3. Leyes constitutivas	16
2.2.2. Relaciones termodinámicas	17
2.2.2.1. Potenciales termodinámicos para medios magnéticos	18
2.2.2.2. Termodinámica del no equilibrio	18
2.3. Intercambio y anisotropía	19
2.3.1. Intercambio	19
2.3.1.1. Aspectos energéticos	21
2.3.2. Anisotropía	22
2.3.2.1. Ruptura de la simetría	22
2.3.2.2. Anisotropía uniaxial	23
2.3.2.3. Anisotropía cúbica	24
2.4. Micromagnetismo	25
2.4.1. Energía magnética libre dependiente del espacio	25
2.4.2. Ecuaciones del micromagnetismo	26
2.4.2.1. Ecuaciones de Brown	27
2.4.2.2. Minimización de la energía	27
2.4.2.3. Dinámica y relajación	28
2.4.3. Aplicaciones en biomedicina	29
2.4.3.1. Propiedades de las nanopartículas magnéticas para su uso en biomedicina	29
2.4.3.2. Superparamagnetismo	29
2.4.3.3. Campos biomédicos de aplicación	30
3. Micromagnetismo computacional	35
3.1. Modelo básico	35
3.2. Discretización e integración numérica	36

3.3. Implementación en GPU. Mumax ³	37
4. Simulaciones micromagnéticas	38
4.1. Test de validación. Standard problem 4	38
4.2. Simulaciones con cuatro esferas superparamagnéticas	42
5. Conclusiones/Conclusions	47
6. Bibliografía y referencias	49
7. Anexo 1	50
8. Anexo 2	52

1. Introducción

El origen del Micromagnetismo se remonta a los años 60, cuando Brown estableció las bases teóricas de este formalismo y Labonte publicó su obra sobre la estructura interna de las paredes de dominio en películas delgadas. Esta teoría facilita la predicción del comportamiento de los materiales magnéticos y permite tratar tanto con problemas estáticos, minimizando la energía hasta encontrar el equilibrio, como con problemas dinámicos, resolviendo las ecuaciones de Brown. El objetivo es conocer $\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$, sobre la que se realiza varias hipótesis, y se trabaja con una longitud de escala intermedia entre los dominios magnéticos y las longitudes atómicas.

Las nanopartículas magnéticas tienen grandes aplicaciones en biomedicina, en áreas tan amplias como la imagen por resonancia magnética, la entrega de fármacos, la transfección genética o en tratamientos de hipertermia. En la mayoría de casos, estas aplicaciones se potencian si además las nanopartículas son superparamagnéticas, donde las de óxido de hierro (SPIONs) son hasta ahora las más biocompatibles. El interés en trabajar con nanopartículas magnéticas, recae en que estas están dotadas de tres propiedades significativas: pueden ser dirigidas por campos no homogéneos, pueden ser detectadas gracias a su campo local, y en presencia de un campo de CA externo, pueden calentar su medio local.

Las simulaciones micromagnéticas son actualmente una herramienta fundamental en el nanomagnetismo debido a su alto poder de predicción, que permite un ahorro enorme en costos y tiempo a las empresas, y la información que proporcionan para la comprensión de la dinámica de magnetización y la interpretación de los resultados experimentales. Programas de software como Mumax³ han permitido poder realizar simulaciones micromagnéticas desde cualquier PC doméstico.

Este trabajo estará centrado en el estudio del comportamiento de los materiales magnéticos a través de la teoría del Micromagnetismo para poder comprender y visualizar, mediante simulaciones, la importancia de sus propiedades a escala nanométrica, en campos de interés actual, como es en este caso la biomedicina. Para ello, se estructura este trabajo en 3 capítulos principales que comprenderán las siguientes áreas: teórica (Capítulo 2), donde se asentarán las bases teóricas para el entendimiento de los fenómenos que ocurren en los materiales magnéticos y qué mecanismos son los que causan este comportamiento, hasta llegar a las ecuaciones del Micromagnetismo (la totalidad de estos conceptos se extrae de los capítulos 3, 4, 5, y 6 de [1]), describiéndose también los principales campos de aplicación dentro de la biomedicina (este desarrollo se sustenta sobre los artículos de referencia [2], [3], [4] y [5]); computación (Capítulo 3), donde se explicará la manera de implementar los conocimientos micromagnéticos adquiridos en el Capítulo 2 para simulaciones posteriores en el software Mumax³ (el artículo de referencia utilizado aquí es [9]); simulaciones (Capítulo 4), donde primeramente se introducirá en el uso del hardware Mumax³ a través de la simulación de un problema estándar (se validarán los resultados obtenidos con los proporcionados por el NIST, [6] y [7]), para después pasar a simular cuatro esferas superparamagnéticas. Las conclusiones obtenidas de este trabajo se resumen en el Capítulo 5.

2. Introducción a la teoría del micromagnetismo

2.1. Ecuaciones de Maxwell en Medios Magnéticos

La característica más representativa de un material magnético es la capacidad para dar lugar, por sí mismo, a un campo magnético estático en su espacio exterior. De acuerdo con las leyes de Maxwell, un campo magnético estático es producido por corrientes eléctricas estacionarias, cuya naturaleza se sabe que es cuántica. Una solución a cómo tratar estos efectos cuánticos en el marco clásico de las ecuaciones de Maxwell, es postular la existencia en la materia magnetizada de momentos magnéticos elementales puntuales y permanentes, y describir un material magnético como un conjunto de tales momentos. Así, todos los efectos cuánticos quedan agrupados en las propiedades de los momentos individuales.

Un segundo punto relevante de estos materiales, es que el movimiento de las cargas y los portadores de momento elementales es extremadamente intrincado e irregular. Es por ello que en lugar de considerar la cantidad F_{micro} , que describiría alguna propiedad de interés a escala microscópica, se introduce, en cada punto \mathbf{r} del espacio, su promedio local:

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} F_{micro} d^3r \quad (2.1)$$

donde ΔV es un *volumen elemental* centrado alrededor de \mathbf{r} , lo suficientemente pequeño comparado con la escala característica de interés, pero todavía lo suficientemente grande como para contener en cualquier tiempo un número substancial de partículas. Trabajando con promedios ΔV se pierden detalles finos de los procesos que ocurren dentro de cada elemento de volumen, pero a cambio se obtiene una descripción en términos de cantidades más suaves, perfectamente adecuadas para el estudio del fenómeno que tiene lugar a escala mucho más grande que ΔV .

2.1.1. Magnetostática

La *Magnetostática* se interesa por aquellos fenómenos magnéticos producidos por corrientes estacionarias, es decir, independientes del tiempo. Incluso puede extenderse a aquellas situaciones que, aun siendo dinámicas, implican variaciones de corriente tan lentas que se puede suponer que en cada instante de tiempo el sistema se comporta como si estuviera en condiciones estacionarias. Como las ecuaciones magnetostáticas son una restricción de las ecuaciones de Maxwell, se comenzará por dar una breve descripción de estas últimas.

2.1.1.1. Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell en su forma general y diferencial son:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.3)$$

$$\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{j} \quad (2.5)$$

donde ϵ_0 es la *permitividad del vacío* y μ_0 la *permeabilidad magnética del vacío*. Tanto el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, como la inducción magnética $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ y las densidades de carga eléctrica ρ y de

corriente \mathbf{j} representan los promedios de dichas cantidades sobre el elemento de volumen ΔV centrado alrededor de \mathbf{r} de acuerdo con (2.1).

La ecuación (2.2) es la *Ley de Gauss* para el campo magnético y representa la ausencia de cargas magnéticas (\mathbf{B} es siempre solenoidal), mientras que la ecuación (2.3) es conocida como la *Ley de Faraday* de inducción. Ninguna de estas dos ecuaciones incluye términos dependientes de las fuentes de campo, lo cual quiere decir que expresan propiedades intrínsecas del campo electromagnético, válidas bajo cualquier circunstancia. El acoplo entre el campo electromagnético y sus fuentes viene descrita por las ecuaciones (2.4) y (2.5). La ecuación (2.4) es la *Ley de Gauss* para el campo eléctrico, y muestra que la densidad de carga es la fuente del mismo. Por otra parte, la ecuación (2.5) representa la *Ley de Ampère*. Su carácter general es debido al término $\epsilon_0 \partial \mathbf{E} / \partial t$, que solo se tendrá en cuenta para fenómenos de alta frecuencia. Estas últimas no son independientes, pues tomando la divergencia de (2.5) y sustituyendo por la ecuación (2.4) se llega a la *ecuación de continuidad* para la densidad de carga, que expresa la conservación de la carga eléctrica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.6)$$

La descripción del acoplamiento entre el campo electromagnético y las cargas eléctricas se completa con la *fuerza de Lorentz*:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.7)$$

la cual, cuantifica la fuerza que experimenta una carga q moviéndose a velocidad \mathbf{v} en el seno de un campo electromagnético. Si se considera la fuerza por unidad de volumen \mathbf{F} actuando sobre distribuciones continuas de carga y corriente, (2.7) se transforma en:

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B} \quad (2.8)$$

2.1.1.2. Corrientes estacionarias

La ecuación de continuidad muestra el carácter solenoidal de las densidades de corriente estacionarias, $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$. Este comportamiento solenoidal de \mathbf{j} implica que se puede subdividir una distribución de corriente en tubos de flujo de corriente, limitados por líneas de corriente tangenciales a la sección transversal del tubo, conservándose la integral de la densidad de corriente sobre la sección transversal a lo largo del tubo, cuya magnitud es la corriente I fluyendo a lo largo del tubo.

La *ley de Biot-Savart*, en su forma integral, describe el campo $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ creado en la posición \mathbf{r} por un bucle de corriente cerrado y de forma arbitraria:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \frac{d\mathbf{l}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (2.9)$$

donde $I d\mathbf{l}(\mathbf{r}')$ es un elemento de corriente filamental y la integral se calcula sobre todo el bucle.

La linealidad de los efectos electromagnéticos permite expresar el campo creado por multitud de bucles de corriente sin más que tomar las expresiones equivalentes para los elementos de corriente volumétricos ($\mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3 r'$) o superficiales ($\mathbf{k}(\mathbf{r}') d^2 r'$). Se concluye, por tanto, que el campo debido a una distribución de corriente solenoidal arbitraria será:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r' \quad (2.10)$$

o en su forma equivalente, previo análisis vectorial, como:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \right) \quad (2.11)$$

que permite ver, aplicando la divergencia a (2.11), que \mathbf{B} satisface la ecuación (2.2) de las leyes de Maxwell, y esta es, por tanto, una de las dos ecuaciones fundamentales que gobiernan la Magnetostática. Si ahora se aplica el rotacional (2.11), se llega a la expresión:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \frac{1}{4\pi} \nabla \left(\int \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \right) \quad (2.12)$$

donde el carácter solenoidal de \mathbf{j} en condiciones estacionarias ($\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) permite reducir dicha expresión a la ecuación (2.5) de las leyes de Maxwell cuando las corrientes de desplazamiento son ignoradas:

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{j} \quad (2.13)$$

Esta expresión es la segunda ecuación fundamental que gobierna la Magnetostática.

Los problemas magnetostáticos son tratados convenientemente introduciendo el potencial vector \mathbf{A} , definido de la forma:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.14)$$

que garantiza el cumplimiento de (2.2). Con esta definición, la expresión (2.13) queda como:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (2.15)$$

El hecho de que el campo observado sea \mathbf{B} y no \mathbf{A} , dota de cierta arbitrariedad en la elección de \mathbf{A} . En particular, tomando el *gauge de Coulomb*, donde $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, se llega a que el potencial vector satisface la *ecuación de Poisson*:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j} \quad (2.16)$$

cuya solución, bajo las condiciones apropiadas de contorno, no es más que el término que aparece en la expresión (2.12) como no podía ser de otra forma:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (2.17)$$

2.1.1.3. Momentos magnéticos

A la hora de lidiar con distribuciones de corriente complejas, es importante extraer los términos dominantes del campo magnético creado por dicha distribución, dejando los detalles adicionales a aproximaciones de orden superior. Para ello, se considera una distribución de corriente en una región Ω del espacio. Se toma el origen de coordenadas en un punto dentro de Ω y se procede a calcular el potencial vector a largas distancias de la región, es decir, en posiciones \mathbf{r} tales que $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ cuando \mathbf{r}' varía sobre Ω . Haciendo un desarrollo en serie del término $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ de la ecuación (2.17), se llega a:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{1}{r} \int_{\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3r' + \frac{1}{r^3} \int_{\Omega} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3r' + \dots \right] \quad (2.18)$$

El primer término (término monopolar) es nulo por ser \mathbf{j} solenoidal y estar confinada en Ω . El segundo término (término dipolar) es el primero no nulo del desarrollo y será, por tanto,

el dominante, pues el resto van como $1/r^n$ con $n > 3$. De nuevo, empleando el hecho de que \mathbf{j} es solenoidal y está confinado en Ω , permite desarrollar la segunda integral hasta llegar a la expresión:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{r}}{r^3} + \dots \quad (2.19)$$

donde

$$\mathbf{m} = \int_{\Omega} \frac{\mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')}{2} d^3r' \quad (2.20)$$

representa el *momento magnético* de la distribución de corriente. Si la corriente es producida por el movimiento de partículas, todas con la misma relación carga-masa q_0/m_0 , (2.20) se reduce a:

$$\mathbf{m} = \frac{q_0}{2m_0} \mathbf{L} \quad (2.21)$$

donde \mathbf{L} es el *momento angular orbital* total del sistema de partículas. Por otro lado, si \mathbf{m} está asociado con un bucle de corriente elemental portando una corriente I y rodeando un área A , entonces el momento magnético será:

$$\mathbf{m} = \mathbf{n}AI \quad (2.22)$$

con \mathbf{n} el vector unitario normal a A .

Dada una distribución de corriente genérica, (2.19) es válida cuando r es mucho más grande que las dimensiones de la región en la cual la distribución está confinada. Para tratar estos casos, se introduce el concepto idealizado de *momento magnético elemental* o *dipolo magnético*, entendiéndolo como una fuente puntual de intensidad \mathbf{m} , que genera un potencial vector dado por (2.19) en todos lados. El *campo dipolar* creado por el momento en cualquier punto $\mathbf{r} \neq 0$ se calculará entonces mediante el rotacional de (2.19):

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{m})}{r^5} - \frac{\mathbf{m}}{r^3} \right] \quad (2.23)$$

Para tener en cuenta la singularidad de (2.23) en el origen, se considera un resultado general de la Magnetostática, por el que dada una distribución de corriente confinada en una región del espacio Ω , el campo $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ generado por esta, tiene la propiedad de que su integral de volumen sobre cualquier esfera que contenga Ω es igual a:

$$\int_{esfera} \mathbf{B}(\mathbf{r}') d^3r' = \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{m} \quad (2.24)$$

con \mathbf{m} el momento magnético de la distribución de corriente. Se puede modificar (2.23), para que sea compatible con (2.24), de la siguiente manera:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{m})}{r^5} - \frac{\mathbf{m}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \mathbf{m} \delta(\mathbf{r}) \right] \quad (2.25)$$

Esta modificación mantiene el cumplimiento de $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ en todo lugar y no altera el valor del campo para $r \neq 0$, y al mismo tiempo, la singularidad en el origen resume todos los detalles a pequeña escala de la distribución de corriente responsable de \mathbf{m} .

2.1.2. Medios magnéticos

Las corrientes microscópicas, \mathbf{j}_{micro} , responsables del campo magnético que es capaz de producir la materia magnetizada, derivan del movimiento electrónico dentro de los átomos y del *momento angular de espín* de los electrones. Aunque su origen es cuántico, por el momento, \mathbf{j}_{micro} será tratado por los métodos desarrollados en la sección previa para describir el campo lejano de una distribución de corriente estacionaria genérica.

La existencia de corrientes microscópicas describiendo propiedades de los medios magnéticos lleva a la introducción de un campo adicional, el campo magnético \mathbf{H} , de vital importancia a la hora de caracterizar los efectos magnetostáticos que ocurren en presencia de medios magnéticos.

2.1.2.1. Momentos magnéticos y magnetización

Se considera un medio magnético donde solo hay presentes corrientes microscópicas. El tratamiento de estas corrientes será análogo al visto en (2.1), es decir:

$$\mathbf{j}_M(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \mathbf{j}_{micro}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (2.26)$$

donde \mathbf{j}_M se llamará *corriente de magnetización* y representa la densidad de corriente involucrada en la ecuación de Maxwell (2.5). La principal característica de \mathbf{j}_M es que no involucran flujo macroscópico de cargas a través del cuerpo, como consecuencia de que describen bucles de corriente confinados a distancias atómicas. Esto dará, como resultado, que la integral de \mathbf{j}_M sobre cualquier sección transversal S del cuerpo deberá ser cero:

$$\int_S \mathbf{j}_M \cdot d\mathbf{a} = 0 \quad (2.27)$$

Por el teorema de la divergencia, \mathbf{j}_M podrá ser expresada como el rotacional de otro vector, el vector *magnetización* del cuerpo $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, como:

$$\mathbf{j}_M(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

El significado físico de \mathbf{j}_M queda claro cuando se considera el momento magnético total (2.20) asociado a la corriente de magnetización $\mathbf{j}_M(\mathbf{r})$ (2.28). Esto es:

$$\mathbf{m} = \int_{\Omega} \frac{\mathbf{r}' \times (\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}'))}{2} d^3 r' \quad (2.29)$$

Haciendo uso de la relación vectorial $\mathbf{r} \times (\nabla \times \mathbf{M}) = \nabla(\mathbf{r} \cdot \mathbf{M}) - (\mathbf{r} \cdot \nabla)\mathbf{M} - \mathbf{M}$ y teniendo en cuenta que $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 0$ fuera del medio, se puede desarrollar la integral (2.29) hasta llegar a:

$$\mathbf{m} = \int_{\Omega} \mathbf{M}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (2.30)$$

que muestra que $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ representa la densidad de momento magnético en el cuerpo. Sin embargo, (2.28) no define unívocamente $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, pues se podría añadir a \mathbf{M} un gradiente de una función arbitraria, y esto no tendría ningún efecto en $\nabla \times \mathbf{M}$. Esta arbitrariedad se elimina considerando que el cuerpo consiste en una colección de momentos elementales \mathbf{m}_i , de manera que, se puede asociar un momento magnético $\Delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{m}_i$ a cada elemento de volumen ΔV . La magnetización, consistente con (2.30), queda entonces descrita para cada volumen elemental como $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = (\sum_i \mathbf{m}_i)/\Delta V$.

Si además de los efectos magnéticos, se tienen en cuenta los de polarización y la presencia de corrientes de conducción, en las ecuaciones de Maxwell (2.4) y (2.5), habrá que considerar la contribución de estas últimas, así como de la densidad de carga $\rho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P}$ y de corriente $\mathbf{j}_p = \partial \mathbf{P} / \partial t$ de polarización. Las ecuaciones (2.4) y (2.5) ahora se leen como:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j} \qquad (2.31)$$

donde ρ y \mathbf{j} son la densidad de carga y de corriente libres respectivamente. También quedaron definidos, respectivamente, los campos de desplazamiento eléctrico y magnético como:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \qquad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} \qquad (2.32)$$

En presencia de medios magnéticos, el campo \mathbf{H} o *campo magnético* toma el lugar de la *inducción magnética* \mathbf{B} , de manera que, la segunda ley de la Magnetostática, la ecuación (2.13), a partir de ahora, será:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} \qquad (2.33)$$

La naturaleza y origen de \mathbf{j}_M pueden ser esclarecidos solamente en el marco de la mecánica cuántica. Por la ecuación relativista de Dirac para el electrón, se sabe que no solo la densidad de corriente orbital, sino que también la densidad de corriente de espín, toma la forma de las corrientes de magnetización vista en (2.28). En particular, el magnetismo de los materiales ferromagnéticos es básicamente debido al *momento angular de espín* del electrón. En este caso, el momento magnético de espín dado por (2.30), es igual al valor esperado de $(q_e/m_e)\mathbf{s}$. \mathbf{s} representa el operador de momento angular de espín, y su componente a lo largo de una dirección dada puede tomar los valores $\pm h/4\pi$, con h la *constante de Planck*. Los posibles valores para el momento magnético serán entonces $\pm \mu_B = \pm h q_e / 4\pi m_e$, cantidad que se conoce como el *magnetón de Bohr* y que representa la unidad atómica natural de los momentos magnéticos. El momento de espín del electrón produce un campo \mathbf{B} del tipo discutido en la Sección 2.1.1.3., y se comporta como un momento magnético elemental.

2.1.2.2. Analogía electrostática

En este apartado se va a asumir que la magnetización de un cuerpo es conocida de antemano y además es permanente. El objetivo será el estudio, análogo al realizado en electrostática, de las propiedades de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, dejando el estudio de los procesos que crean esta situación para tratamientos posteriores. Las ecuaciones de la magnetostática, (2.2) y (2.33), en un espacio libre de corrientes de conducción, vienen dadas por:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_M = 0 \qquad \nabla \times \mathbf{H}_M = 0 \qquad (2.34)$$

donde el subíndice M es para indicar que estos campos se deben únicamente a la existencia de una cierta magnetización $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ en el sistema. Estas pueden reescribirse utilizando (2.28) y la segunda expresión de (2.32), para dar:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_M = 0 \qquad \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B}_M = \mathbf{j}_M \qquad (2.35)$$

El potencial vector que caracteriza al problema viene dado por (2.17):

$$\mathbf{A}_M(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' \qquad (2.36)$$

Otra manera equivalente de escribir las ecuaciones para la magnetostática es:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}_M = \rho_M \qquad \nabla \times \mathbf{H}_M = 0 \qquad (2.37)$$

donde $\rho_M = -\nabla \cdot \mathbf{M}$ sería la densidad de carga magnética, en analogía con la electrostática. En realidad se refiere a cargas ficticias, pues los monopolos magnéticos no existen. Siguiendo con esta analogía, se puede introducir el *potencial escalar magnético*, ϕ_M , definido por la relación:

$$\mathbf{H}_M = -\nabla \phi_M \qquad (2.38)$$

que garantiza el cumplimiento de $\nabla \times \mathbf{H}_M = 0$. Teniendo en cuenta (2.37) se llega a que ϕ_M cumple la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 \phi_M = -\rho_M \qquad (2.39)$$

cuya solución muestra un paralelismo claro entre la magnetostática y la electrostática:

$$\phi_M(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' \qquad (2.40)$$

Para un cuerpo magnético de dimensiones finitas, \mathbf{M} sufrirá variaciones repentinas en la superficie del mismo, pues $\mathbf{M} = 0$ fuera del material. Esto produce un comportamiento cuasi-singular de $\nabla \cdot \mathbf{M}$ y $\nabla \times \mathbf{M}$ en la superficie del cuerpo, que dará una contribución separada a las integrales de (2.36) y (2.40). En el caso ideal en que \mathbf{M} discontinuamente se haga cero en la superficie del cuerpo:

$$\mathbf{A}_M(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' - \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_S \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} da' \qquad (2.41)$$

$$\phi_M(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} da' \qquad (2.42)$$

donde S y V indican la superficie límite y el volumen del cuerpo respectivamente. Las cantidades:

$$\mathbf{k}_M = -\mathbf{n} \times \mathbf{M} \qquad (2.43)$$

$$\sigma_M = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M} \qquad (2.44)$$

con \mathbf{n} el vector unitario normal al elemento superficial da' y dirigido hacia fuera del cuerpo, describen los efectos de las singularidades en la superficie del cuerpo, y juegan el papel de *corriente de magnetización superficial* y *densidad de carga magnética superficial*.

2.1.2.3. Campos de desmagnetización

De especial importancia es la situación en que la magnetización es uniforme en todo lugar dentro del cuerpo magnético. Es decir, $\nabla \cdot \mathbf{M} = 0$ dentro del cuerpo y solo la integral de superficie intervendrá en el cálculo del potencial escalar, que queda reducido a:

$$\phi_M(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \mathbf{M} \cdot \int_S \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} da' \qquad (2.45)$$

Es decir, aparte de la proporcionalidad general en \mathbf{M} , ϕ_M está determinado únicamente por la forma geométrica del cuerpo. En particular, si el cuerpo es elipsoidal y \mathbf{M} es uniforme, calculando \mathbf{H}_M a través de (2.38) y (2.45), se encuentra que este también es uniforme dentro del material. Si \mathbf{M} yace a lo largo de uno de los ejes principales del elipsoide, \mathbf{H}_M lo hará en la misma dirección, pero en sentido opuesto (ver Figura 7.1 del Anexo 1):

$$\mathbf{H}_M = -N\mathbf{M} \qquad (2.46)$$

En estas circunstancias, al campo \mathbf{H}_M se le conoce como *campo desmagnetizante*, pues se opone a la magnetización, y al coeficiente N como el *factor desmagnetizante*. El valor de N depende del eje elipsoidal a lo largo del cual yace \mathbf{M} , es por eso que se tendrán tres factores desmagnetizantes, N_a , N_b y N_c , asociados con cada uno de los ejes principales del elipsoide, a , b y c . En general se cumple que:

$$N_a + N_b + N_c = 1 \quad (2.47)$$

En el caso general en que \mathbf{M} no yace a lo largo de un eje principal, la linealidad del problema permite descomponer \mathbf{M} a lo largo de los tres ejes principales y superponer los campos desmagnetizantes que siguen. Los factores desmagnetizantes serán ahora los autovalores de un tensor desmagnetizante, que será diagonal cuando los ejes principales del elipsoide son tomados como los ejes cartesianos: x , y , z . En ese caso, la relación (2.46) viene dada por:

$$\begin{pmatrix} H_{Mx} \\ H_{My} \\ H_{Mz} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} N_a & 0 & 0 \\ 0 & N_b & 0 \\ 0 & 0 & N_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

Los campos desmagnetizantes dependen de la forma geométrica del cuerpo, pero no de sus dimensiones absolutas, por lo que, si se cambia el tamaño del cuerpo, modificando todas sus dimensiones lineales por el mismo factor de escala, el campo desmagnetizante dentro del cuerpo seguirá siendo el mismo. Esta invariancia de escala juega un rol decisivo en la formación de los dominios magnéticos.

Para un cuerpo de forma arbitraria, \mathbf{H}_M es generalmente no uniforme dentro del mismo, incluso aunque \mathbf{M} sí lo sea, por lo que, ningún campo desmagnetizante puede asociarse con el cuerpo. Un caso de interés físico, cuando no interesan los efectos desmagnetizantes, pues afectarían substancialmente a las propiedades de histéresis del material, es un cuerpo en forma de anillo o marco, en el que se supone que $\nabla \cdot \mathbf{M} = 0$ dentro del mismo, y que \mathbf{M} es tangencial a la superficie en todas las partes del cuerpo. De acuerdo con (2.42), ambas integrales son cero, y por (2.38), \mathbf{H}_M también lo será. Las configuraciones donde $\mathbf{H}_M = 0$ son también interesantes desde el punto de vista energético, pues como se verá, los campos desmagnetizantes siempre conllevan un costo energético.

2.1.3. Relaciones energéticas

No es tan obvio extender la analogía entre la magnetostática y la electrostática al estudio de los aspectos energéticos, pues, mientras que el campo eléctrico \mathbf{E} es un vector de fuerza, realizando trabajo sobre las cargas, el campo \mathbf{B} no realiza trabajo, porque el término magnético de la fuerza de Lorentz, $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, es perpendicular a la velocidad de los portadores de carga. Para calcular la energía asociada con una configuración magnetostática dada, se tiene que considerar el trabajo realizado por los campos eléctricos transitorios inducidos por la ley de Faraday cuando se construye esa configuración.

2.1.3.1. Energía de distribuciones de corriente estacionarias

Se tiene una cierta distribución de corrientes en una región del espacio con materiales magnéticos presentes. La idea es construir esta distribución incrementando gradualmente las corrientes desde cero hasta sus valores finales. Al encender las corrientes, procesos internos ocurrirán en los materiales, por lo que, en general, el trabajo necesario para construir la configuración dependerá de las propiedades de los medios magnéticos presentes. Para expresar esto en términos

cuantitativos, se parte de un conjunto de bucles de corriente L_k , donde I_k indica la corriente que fluye por el bucle k-ésimo, R_k la resistencia eléctrica del bucle, y V_k el voltaje proporcionado por la fuente de energía que mantiene a la corriente fluyendo por el bucle. Ahora se supone que las corrientes y los campos magnéticos producidos por ellas son lentamente cambiantes en el tiempo, y por la ley de Faraday se sabe que esto inducirá una f.e.m en cada bucle de corriente. El flujo magnético ϕ_k asociado al bucle k-ésimo es:

$$\phi_k = \int_{S_k} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} = \oint_{L_k} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad (2.49)$$

donde S_k es una superficie abierta delimitada por L_k . Para cada bucle, la ecuación de balance de voltaje es entonces:

$$V_k = R_k I_k + \frac{d\phi_k}{dt} \quad (2.50)$$

Multiplicando por I_k y sumando sobre k, se obtiene la energía total suministrada por unidad de tiempo por las fuentes de voltaje. El término $\sum_k R_k I_k^2$ representa la energía disipada por efecto Joule en los bucles de corriente, y como nada tiene que hacer con la presencia de medios magnéticos, se ignora. El término restante, $\sum_k I_k d\phi_k/dt$, es el relevante, pues muestra el ritmo al que la energía es almacenada en la configuración magnética a medida que progresivamente se va incrementando las corrientes desde cero hasta sus valores finales. Si el flujo varía como $\delta\phi_k$ en un intervalo de tiempo δt , la variación de energía correspondiente será:

$$\delta U = \sum_k I_k \delta\phi_k \quad (2.51)$$

Este resultado puede generalizarse al caso de una distribución continua de corrientes estacionarias de densidad \mathbf{j} , siempre que esta última sea solenoidal, como se explicó al comienzo de la Sección 2.1.1.2. Expresando I_k en términos de \mathbf{j} y teniendo en cuenta (2.49), se llega a:

$$\delta U = \int \mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A} d^3 r \quad (2.52)$$

Si se pasa lentamente de un estado de referencia inicial S_0 donde todas las corrientes son cero, al estado final de interés, S , la energía total gastada por las fuentes de voltaje será:

$$U = \int d^3 r \int_{S_0}^S \mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A} \quad (2.53)$$

Cuando no hay ningún medio magnético presente, \mathbf{A} está determinado por (2.17) y la integración sobre la transformación de S_0 a S da:

$$U = \frac{1}{2} \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} d^3 r \quad (2.54)$$

Sin embargo, es conveniente expresar (2.53) en términos de \mathbf{H} y \mathbf{B} , pues la relación entre \mathbf{A} y \mathbf{j} se ve alterada por la presencia de \mathbf{j}_M . Recordando que $\nabla \times \delta \mathbf{A} = \delta \mathbf{B}$ y $\mathbf{j} = \nabla \times \mathbf{H}$, y haciendo uso de la relación vectorial $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$, se llega a:

$$\mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A} = \nabla \cdot (\mathbf{H} \times \delta \mathbf{A}) + \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B} \quad (2.55)$$

Integrando (2.55) sobre todo el espacio y con las fuentes en una región limitada, solo contribuirá el segundo término, pues por el teorema de divergencia, la contribución del primero dará cero. Así se llega a:

$$U = \int d^3 r \int_{S_0}^S \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B} \quad (2.56)$$

La ecuación (2.56) representa el trabajo gastado en construir una cierta configuración de corriente en términos de las modificaciones magnéticas que esto produce en los medios magnéticos. Se puede estimar este trabajo si se conoce la ley constitutiva $\mathbf{B}(\mathbf{H})$, en particular, si esta es lineal e isotropa, $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$, (2.56) puede ser integrada y se obtiene:

$$U \int \frac{B^2}{2\mu} d^3r = \int \frac{\mu H^2}{2} d^3r \quad (2.57)$$

que aplicada al vacío, se usará $\mu = \mu_0$.

2.1.3.2. Energía de momentos magnéticos individuales

Se considera el caso particular de una distribución de corriente compuesta de dos contribuciones, \mathbf{j}_m y \mathbf{j}_a , que se llamarán corriente de momento y de fuente, respectivamente. Por una parte, \mathbf{j}_m está confinado en una región del espacio Ω de dimensiones mucho más pequeñas que la escala de interés, mientras que \mathbf{j}_a fluye en regiones distantes de \mathbf{j}_m y produce un campo \mathbf{B}_a , el *campo aplicado*, casi uniforme en Ω . La energía de la configuración de corriente está dada por (2.54):

$$U = \frac{1}{2} \int (\mathbf{j}_m + \mathbf{j}_a) \cdot (\mathbf{A}_m + \mathbf{A}_a) d^3r = \frac{1}{2} \int \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{A}_m d^3r + \frac{1}{2} \int \mathbf{j}_a \cdot \mathbf{A}_a d^3r + \frac{1}{2} \int (\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{A}_a + \mathbf{j}_a \cdot \mathbf{A}_m) d^3r \quad (2.58)$$

Los dos primeros términos representan la energía necesaria para construir las configuraciones \mathbf{j}_m y \mathbf{j}_a por separado, cuando la otra no está presente. El término restante es el importante, y representa la energía de interacción U_m entre la fuente de momento y de campo. Por el teorema de reciprocidad, U_m se reduce a:

$$U_m = \int_{\Omega} \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{A}_a d^3r \quad (2.59)$$

La asunción de que \mathbf{B}_a , y consecuentemente \mathbf{A}_a , sean casi uniformes sobre Ω , permite una expansión de Taylor de \mathbf{A}_a sobre algún punto dentro de Ω , tomado como origen. Así se obtiene:

$$U_m = \mathbf{A}_a(0) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{j}_m d^3r + \sum_i \nabla A_{ai}(0) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{r} j_{mi} d^3r + \dots \quad (2.60)$$

donde el subíndice i identifica cada una de las tres coordenadas cartesianas. El hecho de que \mathbf{j}_m sea estacionaria y esté confinada en Ω , hace que se cumpla:

$$\int_{\Omega} \mathbf{j}_m d^3r = 0 \quad \mathbf{a} \cdot \int_{\Omega} \mathbf{r} j_{mi} d^3r = - \left[\mathbf{a} \times \int_{\Omega} \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{j}_m}{2} d^3r \right]_i = -[\mathbf{a} \times \mathbf{m}]_i \quad (2.61)$$

donde \mathbf{a} es un vector arbitrario y constante. Aplicando estas dos ecuaciones a (2.60) con $\nabla A_{ai}(0)$ en lugar de \mathbf{a} , se obtiene:

$$U_m = \sum_i [\mathbf{m} \times (\nabla A_{ai})_{\mathbf{r}=0}]_i + \dots = \mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_a)_{\mathbf{r}=0} + \dots = \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a(0) + \dots \quad (2.62)$$

donde $\mathbf{B}_a(0)$ es el valor del campo aplicado en el punto donde se localiza \mathbf{m} .

Ahora, se quiere calcular U_m , pero considerando las fuerzas mecánicas actuando en la distribución de corriente \mathbf{j}_m cuando un campo magnético está presente. Se asume que \mathbf{j}_m es estacionaria en un sistema de referencia fijo con respecto a Ω , pero Ω puede moverse o rotar libremente como un todo. Esto significa que \mathbf{m} se comporta como un vector de módulo constante, que puede modificar su posición y orientación en el espacio. La configuración de interés se construye primeramente encendiendo \mathbf{j}_m y \mathbf{j}_a cuando Ω está muy lejos de \mathbf{j}_a , lo que requiere una energía dada

por los dos primeros términos de (2.58), para después mover \mathbf{m} hasta su posición y orientación final. El trabajo restante dará la energía de interacción. La fuerza total actuando sobre Ω está dada por la fuerza de Lorentz:

$$\mathbf{F}_m = \int_{\Omega} \mathbf{j}_m \times \mathbf{B}_a d^3r \quad (2.63)$$

y el torque total alrededor del centro de gravedad de Ω , que se toma como el origen, es:

$$\mathbf{N}_m = \int_{\Omega} \mathbf{r} \times (\mathbf{j}_m \times \mathbf{B}_a) d^3r \quad (2.64)$$

Se puede hacer una expansión de Taylor del campo aplicado, que deja a la componente de la fuerza, F_{mi} , como:

$$F_{mi} = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \left[B_{ak}(0) \int_{\Omega} j_{mj} d^3r + \nabla B_{ak}(0) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{r} j_{mj} d^3r + \dots \right] \quad (2.65)$$

con ϵ_{ijk} el tensor completamente antisimétrico. Como antes, haciendo uso de (2.61) se llega a:

$$F_{mi} = \left[\frac{\partial(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a)}{\partial x_i} - m_i (\nabla \cdot \mathbf{B}_a) \right]_{\mathbf{r}=0} + \dots \quad (2.66)$$

Como $\nabla \cdot \mathbf{B}_a = 0$, se concluye que:

$$\mathbf{F}_m = [\nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a)]_{\mathbf{r}=0} + \dots \quad (2.67)$$

De (2.64), se encuentra que el torque, a orden más bajo, es igual a:

$$\mathbf{N}_m = \mathbf{m} \times \mathbf{B}_a(0) + \dots \quad (2.68)$$

La fuerza y el torque, dadas por (2.67) y (2.68), muestran que el momento posee una energía potencial:

$$U_m = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a(0) + \dots \quad (2.69)$$

Se va a asumir que \mathbf{m} tiene la energía $-\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a(\mathbf{r})$ cuando está localizado en la posición \mathbf{r} . Ahora, se considera un pequeño cambio arbitrario de configuración, consistente con la restricción de $|\mathbf{m}|$ fijo. El cambio consiste en un cambio $\delta\mathbf{r}$ en la posición del momento y otro cambio $\delta\mathbf{m} = \mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\theta}$ en la orientación del momento, donde $\delta\boldsymbol{\theta}$ apunta a lo largo de un cierto eje y tiene una intensidad igual al ángulo por el cual \mathbf{m} es rotado alrededor de ese eje. El cambio en la energía consecuente con la variación es:

$$-\delta U_m = \mathbf{m} \cdot \delta\mathbf{B}_a + \delta\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a = \mathbf{m} \cdot (\delta\mathbf{r} \cdot \nabla)\mathbf{B}_a + (\mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{B}_a \quad (2.70)$$

Se asume que no hay corrientes \mathbf{j}_a presentes en la región donde \mathbf{m} está localizada, por lo que, (2.70) puede transformarse para dar:

$$-\delta U_m = \delta\mathbf{r} \cdot \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_a) + \delta\boldsymbol{\theta} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{B}_a) \quad (2.71)$$

Por definición, los vectores que multiplican a $\delta\mathbf{r}$ y $\delta\boldsymbol{\theta}$ representan la fuerza \mathbf{F}_m y el torque \mathbf{N}_m actuando sobre \mathbf{m} . La predicción de (2.71) coincide con (2.67) y (2.68), lo que confirma que, (2.69) efectivamente representa la energía potencial del sistema.

La ecuación (2.69) es el opuesto de (2.62), lo que tiene una significancia física importante. De hecho (2.69) no representa la energía total de interacción entre \mathbf{j}_m y \mathbf{j}_a , sino que describe el trabajo mecánico hecho por las fuerzas que actúan sobre el momento magnético, pero no la energía

suministrada por las fuentes de energía que mantienen \mathbf{j}_m y \mathbf{j}_a fijas en magnitud mientras el momento se mueve en el campo. En particular, las corrientes de magnetización dentro del medio magnético son controladas por las leyes de la mecánica cuántica y la energía suministrada por las "fuentes cuánticas" nunca deben entrar en juego directamente. Los momentos magnéticos elementales con los que se describen las corrientes de espín son por definición permanentes, y (2.69) será la expresión energética apropiada.

2.1.3.3. Teorema de Poynting

De las ecuaciones de Maxwell puede derivarse una ecuación general de balance energético, en cierto sentido, una generalización de (2.56), conocida como el *teorema de Poynting*. Tomando el producto escalar entre \mathbf{E} y la segunda expresión de (2.31), se obtiene:

$$\mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) - \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \quad (2.72)$$

donde $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ representa el trabajo realizado por unidad de tiempo por el campo EM sobre las corrientes de conducción. Si ahora se toma el producto escalar entre \mathbf{H} y (2.3), se obtiene:

$$\mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.73)$$

Combinando estas dos últimas expresiones, y con la relación $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$, se llega a:

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \quad (2.74)$$

Ahora se toma la *ley de Ohm* añadiendo un campo \mathbf{E}' , de origen no eléctrico, por el que se caracterizan las fuentes que dirigen el flujo de corriente y que actúan como proveedores de energía.

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{E}') \quad (2.75)$$

Expresando el campo eléctrico como $\mathbf{E} = \mathbf{j}/\sigma - \mathbf{E}'$ e integrando (2.74) sobre un volumen genérico Ω delimitado por la superficie Σ , se obtiene:

$$\int_{\Omega} \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d^3r + \int_{\Omega} \frac{j^2}{\sigma} d^3r = - \oint_{\Sigma} d\mathbf{a} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \int_{\Omega} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}' d^3r \quad (2.76)$$

Este es el *teorema de Poynting* particularizado para un medio magnético, es decir, se ha obviado el término asociado a formas de energía eléctrica. El último término por la derecha representa la energía suministrada a Ω por las fuentes de energía externas, y el término que contiene el vector $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$, conocido como el *vector de Poynting*, representa la energía fluyendo por unidad de tiempo en Ω a través de Σ . La integral de j^2/σ representa la energía irreversiblemente transformada en calor por *efecto Joule*, mientras que, la integral que depende de $\mathbf{H} \cdot \partial \mathbf{B}/\partial t$, representa la energía almacenada como energía del campo magnético o como energía interna del medio magnético.

2.2. Trabajo magnético y Termodinámica

Los principales mecanismos que pueden afectar a la forma de la ley constitutiva, $\mathbf{B}(\mathbf{H})$ o $\mathbf{M}(\mathbf{H})$, de un medio magnético son: los *efectos magnetostáticos*; las variaciones de energía libre debidas a mecanismos a escala atómica, como el *intercambio* y la *anisotropía*; y la *disipación de energía* por histéresis. En esta sección solo se tratará los efectos magnetostáticos.

2.2.1. Trabajo magnético y leyes constitutivas

En esta sección se hará una distinción entre los diferentes mecanismos que se espera que contribuyan a las transformaciones energéticas.

2.2.1.1. Cuerpo magnético como un ensamblaje de momentos magnéticos

Cuando un cuerpo magnético es representado como un ensamblaje de momentos magnéticos elementales y se asume que solo las interacciones magnetostáticas son de relevancia, la *energía magnetostática* representará el trabajo mecánico que es necesario realizar para construir la configuración final del cuerpo pieza por pieza, es decir, llevando cada uno de sus momentos por separado desde el infinito hasta su posición final.

Si los momentos magnéticos elementales vienen representados por \mathbf{m}_i y \mathbf{B}_i es el campo creado por \mathbf{m}_i , entonces, $\sum_i \mathbf{B}_i$ será el campo total creado por todos los momentos. Tomando un elemento de volumen ΔV del cuerpo, lo suficientemente grande como para contener varios momentos elementales y considerando uno de esos momentos, \mathbf{m}_0 , en una posición arbitraria dentro de ΔV , por (2.69), se sabe que la energía potencial experimentada por dicho momento en el campo creado por el resto de momentos es $-\mathbf{m}_0 \cdot \sum_i \mathbf{B}_i$. Con base en (2.1), \mathbf{m}_0 experimentará en promedio el campo obtenido al promediar $\sum_i \mathbf{B}_i$ sobre ΔV , el campo magnetostático creado por el cuerpo:

$$\mathbf{B}_M = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \sum_i \mathbf{B}_i d^3r \quad (2.77)$$

Sin embargo, este no es exactamente el campo que \mathbf{m}_0 experimentará, pues no puede ocupar una posición aleatoria, sino solo aquellas donde no haya ya otros momentos. A (2.77) hay que sustraerle el valor promedio relativo a los valores del campo en las posiciones del resto de momentos presentes en ΔV . De (2.25), para $r = 0$, donde se localiza \mathbf{m}_0 , se obtiene que esta contribución es:

$$\frac{2\mu_0}{3} \frac{1}{\Delta V} \sum_{i \in \Delta V} \mathbf{m}_i = \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{M}$$

La energía potencial promedio de \mathbf{m}_0 en un elemento de volumen ΔV es, por tanto:

$$U_0 = -\mathbf{m}_0 \cdot \left(\mathbf{B}_M - \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{M} \right) \quad (2.78)$$

Sumando las energías de todos los momentos dentro de ΔV y las energías de todos los elementos de volumen ΔV dentro del cuerpo, se obtiene la energía final total del cuerpo:

$$U = -\frac{1}{2} \int_V \mathbf{M} \cdot \left(\mathbf{B}_M - \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{M} \right) d^3r \quad (2.79)$$

donde el factor 1/2 es debido a que cada momento contribuye dos veces a la integral, una como fuente de campo y otra como momento de prueba.

Es conveniente escribir (2.79) en términos del campo \mathbf{H} . Esto se logra simplemente a través de la relación entre campos $\mathbf{B}_M = \mu_0(\mathbf{H}_M + \mathbf{M})$:

$$U = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{M} d^3r - \frac{\mu_0}{6} \int_V M^2 d^3r \quad (2.80)$$

El segundo término es dominante en aquellas configuraciones magnéticas donde M se hace tan grande como sea posible en cada ΔV . Estas configuraciones se ven favorecidas energéticamente

cuando los momentos elementales se alinean en una dirección común. Sin embargo, en la mayoría de casos, como ocurre en los materiales ferromagnéticos, donde el alineamiento de momentos está dominado por la interacción de intercambio, este término juega un rol menor, y es el primer término el que hay que tener en cuenta. La energía magnetostática del cuerpo queda entonces definida como:

$$U_M = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{M} d^3r \quad (2.81)$$

o equivalentemente, integrando sobre todo el espacio:

$$U_M = \frac{\mu_0}{2} \int_V H_M^2 d^3r \quad (2.82)$$

a través de la relación $\mathbf{M} = \mathbf{B}_M/\mu_0 - \mathbf{H}_M$ y explotando el hecho de que $\int \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{B}_M d^3r = 0$ por ser $\nabla \cdot \mathbf{B}_M = 0$ y $\nabla \times \mathbf{H}_M = 0$.

2.2.1.2. Conservación de energía y trabajo magnético

Se quiere ver cuáles son las relaciones generales existentes entre un campo externo aplicado sobre un cuerpo magnético, y la magnetización resultante de este. Para ello, se considera una configuración inicial, como puede ser un solenoide, aislado de cualquier cuerpo magnético a su alrededor, por el que circulan ciertas corrientes \mathbf{j}_a que crean un campo magnético, el *campo aplicado* $\mathbf{B}_a = \mu_0 \mathbf{H}_a$, en el espacio vacío. El campo \mathbf{H}_a satisface que:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}_a = 0 \quad \nabla \times \mathbf{H}_a = \mathbf{j}_a \quad (2.83)$$

Ahora, se inserta un cuerpo magnético en algún lugar de la configuración inicial. El campo creado por las corrientes inducirá una cierta magnetización \mathbf{M} en el cuerpo, uniforme o no. El campo magnetostático \mathbf{H}_M creado por \mathbf{M} obedece (2.37). Además, la linealidad de las ecuaciones de Maxwell permitirá escribir el campo \mathbf{H} total existente y la inducción magnética como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_a + \mathbf{H}_M \quad (2.84)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0(\mathbf{H}_a + \mathbf{H}_M + \mathbf{M}) \quad (2.85)$$

En cuanto a la conservación de la energía, esta viene expresada por el teorema de Poynting, (2.76). Si ahora el volumen de integración Ω se extiende a todo el espacio, el flujo del vector de Poynting va a cero y el trabajo δL realizado por las f.e.m externas \mathbf{E}' en un intervalo temporal pequeño δt será:

$$\delta L \equiv \delta t \int \mathbf{j}_a \cdot \mathbf{E}' d^3r = \int \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B} d^3r + \delta t \int_V \frac{j^2}{\sigma} d^3r \quad (2.86)$$

con V el volumen del cuerpo. Se supone que las corrientes magnetizantes \mathbf{j}_a se encienden poco a poco, de manera que, la disipación de las corrientes inducidas dentro del cuerpo o corrientes de Foucault, pueden ser despreciadas. La expresión del trabajo se reduce a:

$$\delta L = \int \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B} d^3r \quad (2.87)$$

Sin embargo, si se quiere una expresión del trabajo que describa las modificaciones energéticas provocadas por la presencia del cuerpo, es necesario quitar de la expresión (2.87) la parte correspondiente a la energía necesaria para crear el campo aplicado en el espacio vacío. El trabajo magnético relevante es entonces:

$$\delta L = \int (\mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{H}_a \cdot \delta \mathbf{H}_a) d^3r \quad (2.88)$$

Haciendo uso de las expresiones (2.84) y (2.85), la integral se puede expresar como:

$$\delta L = \mu_0 \int \delta(\mathbf{H}_a \cdot \mathbf{H}_M) d^3r + \mu_0 \int \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{H}_M d^3r + \mu_0 \int \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{M} d^3r \quad (2.89)$$

Teniendo en cuenta que la primera integral es cero, porque $\nabla \cdot \mathbf{H}_a = 0$ y $\nabla \times \mathbf{H}_M = 0$, y la expresión (2.82), se llega a:

$$\delta L = \delta U_M + \mu_0 \int_V \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{M} d^3r \quad (2.90)$$

donde la integral solo se evalúa en el volumen V del cuerpo, pues $\mathbf{M} = 0$ fuera de él. Esta expresión muestra las diferentes formas en que la energía puede almacenarse en el sistema. La energía magnetostática U_M actúa como una especie de energía de fondo determinada por la distribución espacial de la magnetización y la forma geométrica del cuerpo. Cualquier proceso adicional a U_M contribuirá al balance energético a través del término:

$$\delta L - \delta U_M = \mu_0 \int_V \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{M} d^3r \quad (2.91)$$

Alternativamente, se podría haber utilizado la expresión (2.81), que junto con el teorema de reciprocidad, hubiese dejado a (2.89) de la forma:

$$\delta U_M = -\frac{\mu_0}{2} \int \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{M} d^3r - \frac{\mu_0}{2} \int \mathbf{M} \cdot \delta \mathbf{H}_M d^3r = -\mu_0 \int \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{M} d^3r \quad (2.92)$$

Insertando (2.92) en (2.90) y tomando en cuenta la expresión (2.84), se obtiene una última expresión para el trabajo magnético:

$$\delta L = \mu_0 \int_V \mathbf{H}_a \cdot \delta \mathbf{M} d^3r \quad (2.93)$$

Su importancia radica en el hecho de que expresa el trabajo magnético en términos de cantidades físicas de interés: el campo aplicado \mathbf{H}_a , que describe la acción de fuentes externas, independientemente de las propiedades del cuerpo, y la magnetización \mathbf{M} , que caracteriza el estado magnético del cuerpo. De hecho, si \mathbf{H}_a es uniforme en la región ocupada por el cuerpo, puede salir fuera de la integral y (2.93) queda como:

$$\delta L = \mu_0 \mathbf{H}_a \cdot \delta \mathbf{m} \quad (2.94)$$

2.2.1.3. Leyes constitutivas

De acuerdo con (2.91), la energía almacenada a través de los diferentes mecanismos internos actuando en el medio vendrá determinada por la ley constitutiva $\mathbf{M}(\mathbf{H})$. Serán precisamente los distintos comportamientos de la curva $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ lo que permitirá hacer una clasificación de los medios magnéticos. Las principales características de cada tipo se resumen en la Figura 2.1. *-Diamagnetismo.* La ley es lineal, $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$, y se cumple para una susceptibilidad negativa. Los valores de $|\chi|$ son del orden de 10^{-6} a 10^{-5} . El diamagnetismo surge del hecho de que, en presencia de un campo externo, los bucles de corriente atómicos, creados por el movimiento orbital de los electrones, tienden a alinearse de manera que se oponen al campo aplicado. Que χ sea negativa implica que la integral de (2.90) lo sea también, pero esto no significa que la energía es liberada por el sistema, sino que, el trabajo total realizado es menor que el trabajo necesario para crear el campo aplicado en el espacio vacío, como puede verse en (2.88), pero igualmente el trabajo total es positivo.

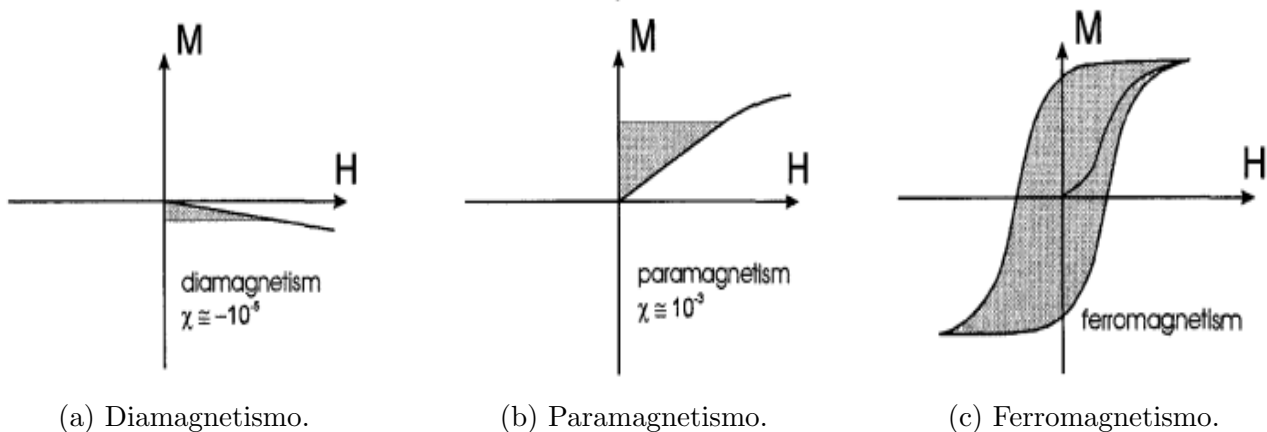


Figura 2.1: Curvas $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ para los distintos comportamientos de los medios magnéticos. *Imagen importada de [1] (Capítulo 4).*

-*Paramagnetismo.* Se caracteriza por una ley lineal para campos bajos, $\mathbf{M} = \chi\mathbf{H}$, con susceptibilidades positivas del orden de 10^{-3} a 10^{-5} . Se observan desviaciones del comportamiento lineal para campos muy altos, del orden de magnitud 10^8Am^{-1} a temperatura ambiente, donde el efecto satura, es decir, todos los momentos comienzan a estar sustancialmente alineados con el campo. El paramagnetismo es la manifestación de la existencia de momentos magnéticos permanentes en la materia. En un *material paramagnético ideal*, no hay interacción entre los momentos (incluso el acoplo dipolar magnetostático es despreciable), y la susceptibilidad será el resultado de la competencia entre la acción del campo externo, que tiende a alinear todos los momentos a lo largo de su dirección, y la agitación térmica, que tiende a destruir cualquier alineamiento posible.

-*Ferromagnetismo.* La característica básica del ferromagnetismo es la existencia de una magnetización espontánea y la histéresis. Una sustancia ferromagnética no puede estar caracterizada por una ley constitutiva única, sino que un conjunto infinito de curvas de magnetización diferentes pueden ser observadas, dependiendo de la historia del campo pasado. Los principales mecanismos que determinan la ley constitutiva son el intercambio y la anisotropía, y son los responsables de la formación de dominios magnéticos. $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ describe al material en una escala mayor que la de los dominios, aparentando ser homogéneos. La energía calculada con (2.91) no se almacena necesariamente en el material por mecanismos reversibles, sino que, parte de ella se transformará en energía térmica debido a los efectos de histéresis.

Cuando se hable de *material ferromagnético* o *magnético* será para referirse, de manera general, a cualquier material donde se observe una magnetización espontánea e histéresis, sin atender al tipo de ordenación a largo de los momentos magnéticos que da lugar a dicha magnetización y que permitiría distinguir entre *ferrimagnetismo* y ferromagnetismo.

2.2.2. Relaciones termodinámicas

El análisis de las propiedades termodinámicas de los materiales magnéticos es complicado por la presencia de histéresis, pues es un fenómeno inherente a la termodinámica del no equilibrio. Para este análisis, en primer lugar se asumirá la ausencia de histéresis, y se obtendrán las relaciones termodinámicas correspondientes al sistema en equilibrio, para después añadir las características típicas de la termodinámica del no equilibrio.

2.2.2.1. Potenciales termodinámicos para medios magnéticos

Se considera un sistema magnético sujeto a transformaciones durante las cuales el volumen del cuerpo permanece descargado, lo que implica que se ignoran todos los fenómenos donde el volumen debería cambiar como consecuencia de cambios de temperatura (expansión térmica) o del campo magnético (magnetostricción). Las relaciones termodinámicas pueden derivarse una vez se tenga una expresión para el trabajo magnético, como puede ser (2.94), con las restricciones que ella conllevaba. El momento magnético $\mu_0 \mathbf{m}$ y el campo \mathbf{H}_a juegan el papel de variable de estado, describiendo una propiedad del sistema, y de parámetro externo al sistema, respectivamente. El interés de este estudio recae en las transformaciones magnéticas donde el sistema está en contacto con un baño térmico, por lo que la *energía libre de Helmholtz* $F(\mathbf{m}, T)$ y *de Gibbs* $G(\mathbf{H}_a, T)$ son los potenciales termodinámicos de interés. Se relacionan entre sí como $G = F - \mu_0 \mathbf{H}_a \cdot \mathbf{m}$ y cumplen que:

$$dF \leq \mu_0 \mathbf{H}_a \cdot d\mathbf{m} - SdT \quad (2.95)$$

$$dG \leq -\mu_0 \mathbf{m} \cdot d\mathbf{H}_a - SdT \quad (2.96)$$

En una transformación reversible a temperatura constante, se da igualdad en las expresiones anteriores, obteniendo las expresiones:

$$\mathbf{H}_a = \frac{1}{\mu_0} \left[\frac{\partial F}{\partial \mathbf{m}} \right]_T \quad (2.97)$$

$$\mu_0 \mathbf{m} = - \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}_a} \right]_T \quad (2.98)$$

que pueden ser utilizadas para derivar la ley constitutiva del sistema $\mathbf{m}(\mathbf{H}_a, T)$, una vez F o G sean conocidas. Según esto, la variación de la energía libre estará dada por:

$$\Delta F = \mu_0 \int \mathbf{H}_a \cdot d\mathbf{m} \quad (2.99)$$

o

$$\Delta G = -\mu_0 \int \mathbf{m} \cdot d\mathbf{H}_a \quad (2.100)$$

Esto muestra que, en condiciones de equilibrio termodinámico en cada punto, es decir, la curva de magnetización es reversible y las pérdidas por histéresis despreciables, se pueden obtener ambos potenciales de la representación de la ley constitutiva del material, como puede verse en la Figura 2.2.

2.2.2.2. Termodinámica del no equilibrio

En la termodinámica del no equilibrio, la segunda ley de la termodinámica debe ser reinterpretada, pues la entropía es una cantidad que puede fluir en el espacio y que además puede ser creada. Se obtiene así una expresión para el balance de entropía:

$$dS = \delta_e S + \delta_i S = \frac{\delta Q}{T} + \delta_i S \quad (2.101)$$

donde $\delta_e S$ representa la entropía generada por el intercambio de energía en forma de calor con el entorno, mientras que $\delta_i S$ es la creación de entropía debida a los procesos irreversibles internos del sistema.

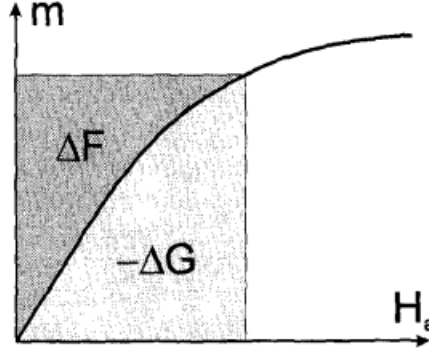


Figura 2.2: Energía libre de Helmholtz y Gibbs estimadas de la curva de magnetización reversible. Las variaciones de F y G están representadas por las áreas delimitadas por la curva de magnetización y los ejes \mathbf{m} o \mathbf{H}_a . *Imagen importada de [1]* (Capítulo 4).

Si el sistema no está en equilibrio, se espera que sus propiedades sean dependientes del espacio y del tiempo, y que varios procesos de relajación y difusión tengan lugar mientras este se acerca al equilibrio. Esto se trata trabajando, sobre cada ΔV , con densidades locales de las magnitudes termodinámicas de interés. Además, en la termodinámica del no equilibrio se asume la *hipótesis de equilibrio local*, que establece que, a pesar de que el sistema en su conjunto no está en equilibrio, este se mantiene en cada ΔV . Esta hipótesis debe ser abandonada cuando $\mathbf{B}(\mathbf{H})$ exhibe histéresis, que describirá el comportamiento de cada ΔV . En este contexto, la energía asociada con el trabajo magnético $\mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{B}$, por una parte, se almacena reversiblemente, pero como este trabajo es también responsable de la producción de entropía, otra parte de la energía se disipa transformándose irreversiblemente en calor. Además, por la inhomogeneidad espacial presente en estructuras con dominios magnéticos, cabe esperar gradientes de temperatura y flujo de calor, lo que complica mucho su estudio. Es por ello que una buena aproximación es considerar al cuerpo magnético como un todo, a una temperatura dada T , siendo así la producción de entropía bastante uniforme. Con estas condiciones, se puede usar (2.101) para reescribir (2.95) y (2.96). En particular (2.95) se transformará a:

$$dF = \mu_0 \mathbf{H}_a \cdot d\mathbf{m} - T\delta_i S - SdT \quad (2.102)$$

que para una transformación a temperatura constante:

$$\mu_0 \int \mathbf{H}_a \cdot d\mathbf{m} = \Delta F + \int T\delta_i S \quad (2.103)$$

que muestra que el trabajo realizado sobre un cuerpo contribuye a la energía libre y a la producción de entropía.

2.3. Intercambio y anisotropía

El intercambio y la anisotropía son los mecanismos internos que, junto con la magnetostática, controlan la aparición de la magnetización macroscópica \mathbf{M} y las propiedades resultantes de $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ en un medio magnético.

2.3.1. Intercambio

En la Sección 2.2.1.3, se vio que solo aplicando campos extremadamente grandes a un material paramagnético se obtiene un alineamiento sustancial de los momentos. Esto contradice la

observación de materiales, que son paramagnéticos a altas temperaturas, y que a temperatura ambiente y bajo campos tan pequeños como unas pocas decenas de Am^{-1} , pueden exhibir una magnetización del orden de 1 T. La hipótesis de *campo molecular de Weiss* resuelve esto, describiendo al material ferromagnético como uno paramagnético donde los momentos ya no están más desacoplados. En este contexto, existirá un campo de interacción fuerte y que opera a escala macroscópica, el *campo molecular*, que favorecerá el alineamiento colectivo de los momentos a lo largo de una dirección común, y es, por tanto, proporcional a M :

$$H_W = N_W M \quad (2.104)$$

donde la constante adimensional N_W mide la fuerza de la interacción. Cada momento experimenta un campo efectivo $H_a + H_W$. La mecánica cuántica estadística permite obtener la *función de partición* Z y la energía libre de Gibbs para un sistema de N momentos de espín $1/2$, que se usará para, a través de (2.98), obtener la magnetización promedio:

$$\frac{M}{M_0} = \tanh \left[\frac{\mu_0 m}{k_B T} (H_a + N_W M) \right] \quad (2.105)$$

donde $M_0 = Nm/\Delta V$ es la máxima magnetización posible, obtenida cuando todos los momentos está perfectamente alineados. Esto muestra que, en presencia de H_W , una magnetización distinta de cero da lugar a un campo que favorece un aumento de la propia magnetización. Expandiendo $\tanh x$ a primer orden, se puede calcular la susceptibilidad para campos pequeños, conocida como la *ley de Curie-Weiss*:

$$\chi = \frac{\mu_0 m M_0}{k_B} \frac{1}{T - T_c} = \frac{C}{T - T_c} \quad (2.106)$$

que cumple $M = \chi H_a$. La *temperatura de Curie* viene dada por:

$$T_c = \frac{\mu_0 m N_W M_0}{k_B} \quad (2.107)$$

Cuando $T \rightarrow T_c$ desde temperaturas más altas, la susceptibilidad tiende a infinito. Para $T > T_c$, si no hay campo externo, la magnetización es cero como cabe esperar en un material paramagnético. La ley falla para $T < T_c$, ya que, si se resuelve (2.105) en ausencia de un campo externo, se obtienen tres soluciones, una inestable en $M/M_0 = 0$ y dos estables en $\pm M/M_0 = \pm M_s/M_0$. Es decir, el sistema ha adquirido una *magnetización espontánea o de saturación* $M_s(T)$. T_c es, por tanto, la temperatura a la que la retroalimentación positiva operada por H_W supera a la agitación térmica y lleva al sistema a un estado globalmente ordenado. Su dependencia con la temperatura se muestra en la Figura 7.2 del Anexo 1.

El *intercambio* permite una interpretación microscópica del campo molecular. Esta interacción ocurre cuando se solapan los orbitales electrónicos del mismo o de diferentes átomos. Dos electrones con espines paralelos y el resto de números cuánticos idénticos, lo que corresponde con una función de onda de espín simétrica, por el Principio de exclusión de Pauli, no pueden estar cerca el uno del otro, pues la función de onda de dos electrones debe ser totalmente antisimétrica, dando lugar así a un acoplamiento entre el momento angular de espín y la función de onda. El hecho de que estos no se acerquen nunca reduce la energía promedio asociada con la interacción electrostática, lo que favorece la configuración paralela del espín.

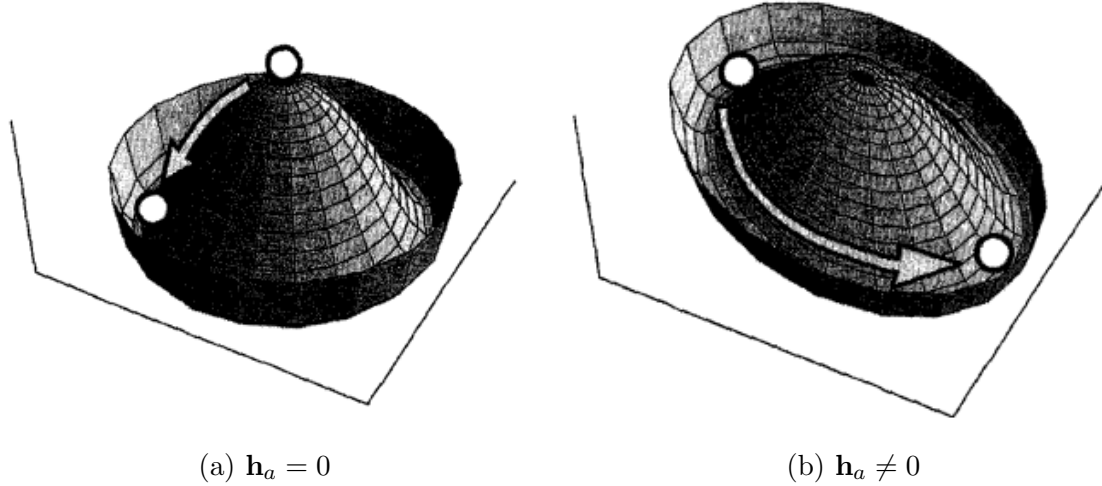


Figura 2.3: Representación de (2.108) que muestra la magnetización espontánea en presencia de una simetría rotacional y continua. *Imagen importada de [1] (Capítulo 5).*

2.3.1.1. Aspectos energéticos

Introduciendo las variables adimensionales $\mathbf{h}_a = \mathbf{H}_a/N_W M_0$, $\mathbf{x} = \mathbf{M}/M_0$, $t = T - T_c/T_c$, de la ecuación (2.105) se puede despejar \mathbf{h}_a e integrar en 2D respecto a \mathbf{x} para dar:

$$g_{EX}(\mathbf{x}; \mathbf{h}_a, t) = \frac{1+t}{2} [(1+x)\ln(1+x) + (1-x)\ln(1-x)] - \frac{x^2}{2} - \mathbf{h}_a \cdot \mathbf{x} \quad (2.108)$$

donde $g_{EX} = G_{EX}/\mu_0 N_W M_0^2 \Delta V$ es la energía adimensional del sistema. El término, proporcional a $1+t = T/T_c$ describe el efecto de la agitación térmica, pues su curvatura positiva favorece el estado de magnetización cero $x = 0$. El otro término, $-x^2/2$, describe el efecto del campo molecular, ya que tiene una curvatura negativa favorecerá a los estados donde $x \neq 0$. En el punto de Curie, $t = 0$, el estado $x = 0$ se vuelve inestable y el sistema espontáneamente adquiere una magnetización distinta de cero (ver Figura 7.3 del Anexo 1). Retomando las cantidades físicas, se puede encontrar la energía por unidad de volumen asociada con el campo molecular:

$$\frac{U_W}{\Delta V} = -\frac{\mu_0}{2} N_W M^2 \quad (2.109)$$

En la ecuación (2.80) se encontró un término análogo para la energía magnetostática, pero en este caso el término del campo molecular es mayor por un factor $3N_W$, que en el caso de hierro, por ejemplo, es del orden de $3N_W \sim 2 \cdot 10^3$. Es decir, la interacción de campo molecular es tres órdenes de magnitud mayor que la magnetostática, lo que refuerza el argumento de despreciar el término de M^2 en la ecuación (2.80) cuando se tiene un material ferromagnético.

Las interacciones de intercambio son isótropas en el espacio, lo que significa que la energía de intercambio de un determinado ΔV es la misma para cualquier orientación del vector magnetización, por lo que, no hay una dirección favorecida a priori para la magnetización espontánea, sino solo esa dirección particular seleccionada por el sistema cuando se establece la magnetización espontánea. Este fenómeno se conoce como *ruptura espontánea de la simetría* y puede visualizarse en la Figura 2.3.

Se encuentra que para $T \ll T_c$:

$$M_s(H_a, T) \cong M_s(0, T) + \frac{H_a T_c}{N_W T} \cosh^{-2} \left(\frac{T_c}{T} \right) \quad (2.110)$$

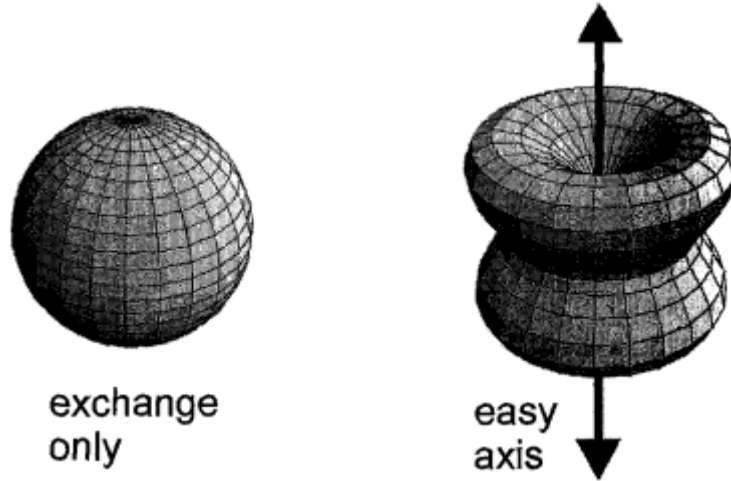


Figura 2.4: Simetría esférica rota con formación de eje de magnetización fácil. En esta representación en 3D, el intercambio isotrópico da lugar a una esfera. *Imagen importada de [1]* (Capítulo 5).

donde puede verse que el segundo término es exponencialmente más pequeño, por lo que, en lo que resta de trabajo, se asumirá que existe una magnetización espontánea de módulo $M_s(T)$ independientemente del campo externo.

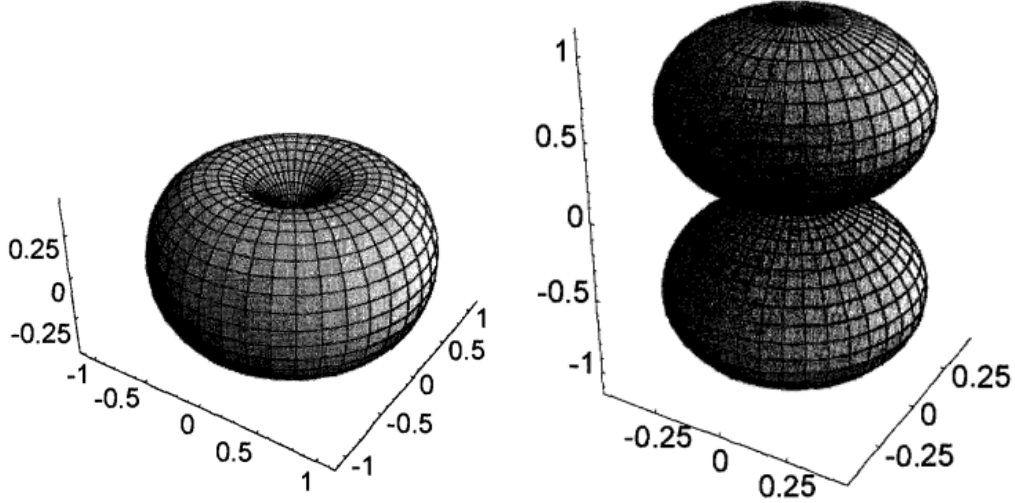
2.3.2. Anisotropía

En realidad, la invariancia rotacional en las interacciones de intercambio es siempre rota por efectos de anisotropía. La *anisotropía* está relacionada con las interacciones de los orbitales electrónicos con el potencial creado por la red. Como la simetría de la red se refleja en la simetría del potencial, el resultado es que la orientación del espín a lo largo de ciertos ejes de simetría de la red se vuelve energéticamente favorecida.

Se emplearán argumentos de simetría, pues las consecuencias de la anisotropía en el comportamiento macroscópico del material magnético está dictado principalmente por la simetría de la energía de anisotropía, más que por los mecanismos microscópicos que llevan a su aparición.

2.3.2.1. Ruptura de la simetría

Dado un cierto volumen ΔV con magnetización uniforme \mathbf{M} , interesa la dependencia de su energía libre $F_{AN}(\mathbf{m})$ con la orientación de \mathbf{M} . Se asume una temperatura fija, donde $|\mathbf{M}| = M_s$ y el estado del sistema estará descrito por el vector unitario de magnetización $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$, identificado con sus componentes cartesianas m_x, m_y, m_z o los ángulos esféricos θ, ϕ . La densidad de energía libre $f_{AN}(\mathbf{m}) = F_{AN}(\mathbf{m})/\Delta V$ se puede representar gráficamente trazándola como una superficie en el espacio, como se ve en la Figura 2.4. $f_{AN}(\mathbf{m})$ está definida salvo una constante, independiente de \mathbf{m} , a la que se dará diferentes valores para obtener superficies energéticas que diferirán en detalles cuantitativos, pero contendrán la misma información sobre la ruptura de simetría. La presencia de depresiones en la superficie de energía muestra las direcciones del espacio a lo largo de las cuales la magnetización tiende a apuntar, a fin de minimizar la energía libre del sistema. Son los llamados *ejes de fácil magnetización*. Las propiedades más importantes de la superficie energética de anisotropía están determinadas por el conjunto de



(a) $K_0 = 0.1, K_1 = 1, K_2 = K_3 = 0$. (b) $K_0 = 1.1, K_1 = -1, K_2 = K_3 = 0$.

Figura 2.5: Superficie energética dada por (2.112) con $K_1 > 0$ (a) y $K_1 < 0$ (b). *Imagen importada de [1] (Capítulo 5).*

direcciones \mathbf{m} que satisfacen la condición de equilibrio:

$$\frac{\partial f_{AN}(\mathbf{m})}{\partial \mathbf{m}} = 0 \quad (2.111)$$

donde sus soluciones representan mínimos locales, identificando los ejes fáciles, o bien puntos de silla o máximos locales, referidos a los *ejes de medio difícil* y *difícil magnetización* respectivamente.

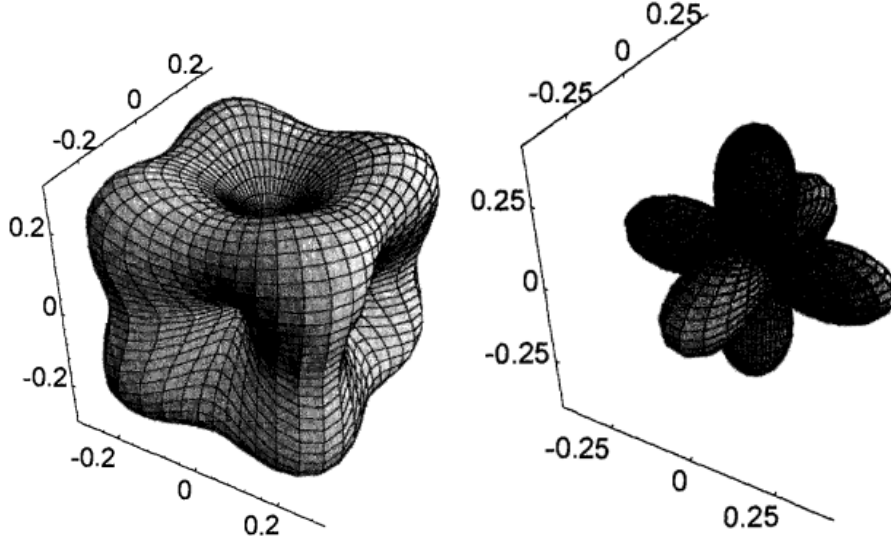
2.3.2.2. Anisotropía uniaxial

Este es el caso donde solo una dirección espacial privilegiada (eje z) controla la energía de anisotropía. Esta energía es invariante con respecto a rotaciones alrededor del eje de anisotropía, y depende solo de la orientación relativa de \mathbf{m} con respecto a este eje. En estas condiciones, la energía de anisotropía es una función par de $m_z = \cos \theta$. Como variable de expansión, en lugar de $\cos^2 \theta$, se usa $m_x^2 + m_y^2 = 1 - m_z^2 = 1 - \cos^2 \theta = \sin^2 \theta$. Entonces, la densidad de energía puede ser descrita por una expansión en serie de potencias de las componentes de la magnetización:

$$f_{AN}(\mathbf{m}) = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^6 \theta + \dots \quad (2.112)$$

donde las *constantes de anisotropía* K_1, K_2, K_3 tienen dimensiones de energía por unidad de volumen. En la Figura 2.5 se representa (2.112) cuando la serie se trunca después del término $\sin^2 \theta$ para dos casos de interés. Cuando $K_1 > 0$ (Figura 2.5 (a)), se tienen dos mínimos de energía en $\theta = 0$ y $\theta = \pi$, que es, cuando \mathbf{m} se encuentra a lo largo del eje de anisotropía en la dirección positiva o negativa. El eje de anisotropía es un eje fácil para \mathbf{m} , sin una orientación preferencial, pues f_{AN} depende de potencias pares de m_z . Este tipo de anisotropía se conoce como *anisotropía de eje fácil*. Ahora se considera que \mathbf{m} yace a lo largo del eje fácil, y se toma este estado como el nivel de energía cero. Para pequeñas desviaciones de \mathbf{m} respecto de la posición de equilibrio, la densidad de energía de anisotropía se puede aproximar a:

$$f_{AN}(\mathbf{m}) \cong K_1 \theta^2 \cong 2K_1 - 2K_1 \cos \theta = 2K_1 - \mu_0 M_s \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} \cos \theta = 2K_1 - \mu_0 \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_{AN} \quad (2.113)$$



(a) $K_0 = 0.1, K_1 = 1, K_2 = 0.$ (b) $K_0 = 0.4, K_1 = -1, K_2 = 0.$

Figura 2.6: Superficie energética dada por (2.115) con $K_1 > 0$ (a) y $K_1 < 0$ (b). *Imagen importada de [1] (Capítulo 5).*

La dependencia angular de la energía de anisotropía es la misma que si hubiera un campo, el *campo de anisotropía*, actuando a lo largo del eje fácil y de intensidad:

$$H_{AN} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} \quad (2.114)$$

Por otro lado, cuando $K_1 < 0$ (Figura 2.5 (b)), la energía tiene un mínimo en $\theta = \pi/2$, que corresponde a \mathbf{m} apuntando en cualquier dirección en el plano $x - y$. En este caso, ya no hay un único eje preferencial, sino una degeneración continua de orientaciones equivalentes. Esta situación se conoce como *anisotropía de plano fácil*.

2.3.2.3. Anisotropía cúbica

Ahora se considera el caso donde la energía de anisotropía tiene simetría cúbica, lo que implica la existencia de tres direcciones privilegiadas (ejes x, y, z). Las combinaciones de orden más bajo de las componentes de \mathbf{m} consistentes con la simetría requerida son $m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2$, $m_x^4 + m_y^4 + m_z^4$, que se relacionan como $m_x^4 + m_y^4 + m_z^4 + 2(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) = (m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)^2 = 1$, y $m_x^2 m_y^2 m_z^2$. El desarrollo de la energía de anisotropía toma la forma:

$$f_{AN}(\mathbf{m}) = K_0 + K_1(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + K_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2 + \dots \quad (2.115)$$

El caso en que $K_2 = 0$ es de interés y se representa en la Figura 2.6. Cuando $K_1 > 0$ (Figura 2.6 (a)), hay seis mínimos de energía equivalentes cuando \mathbf{m} apunta a lo largo de los ejes x, y, z , en las direcciones positiva o negativa. Estas tres direcciones identifican los ejes fáciles, que en notación cristalográfica, son los ejes $\langle 100 \rangle$. El comportamiento de la energía para pequeñas desviaciones alrededor de uno de los ejes fáciles vendrá determinado por un campo de anisotropía de intensidad dada por la ecuación (2.114)

Para $K_1 < 0$ (Figura 2.6 (b)), el rol de las direcciones antes mencionadas cambia, y ahora se tendrán ocho mínimos de energía equivalentes cuando \mathbf{m} apunte en las direcciones $\langle 111 \rangle$. El

campo de anisotropía que gobierna en comportamiento energético alrededor de los ejes fáciles ahora es:

$$H_{AN} = \frac{4}{3} \frac{|K_1|}{\mu_0 M_s} \quad (2.116)$$

2.4. Micromagnetismo

La competencia entre las principales contribuciones energéticas (energía magnetostática, intercambio, anisotropía) darán lugar a los dominios magnéticos y eventualmente es responsable del fenómeno de histéresis en los materiales ferromagnéticos. Sin embargo, como una estructura de dominio no es más que una configuración en la que la magnetización cambia drásticamente de un punto a otro del espacio, es necesario hacer que toda la descripción sea dependiente del espacio.

2.4.1. Energía magnética libre dependiente del espacio

Tanto el intercambio como la anisotropía se analizaron en la Sección 2.3 para un volumen uniformemente magnetizado, pero los materiales magnéticos exhiben patrones de magnetización complicados que exigen una dependencia espacial de la magnetización. Siguiendo la idea descrita al principio de la Sección 2.1, dado un material ferromagnético, se subdivide en elementos de volumen ΔV , lo suficientemente pequeños con respecto a las longitudes características sobre las cuales la magnetización varía significativamente, de manera que se puede considerar que cada volumen tiene propiedades uniformes, y lo suficientemente grandes como para contener un número significativo de momentos magnéticos elementales, y así poder hacer uso de los métodos estáticos y termodinámicos para describir las propiedades del volumen.

Dado un ΔV genérico alrededor de la posición \mathbf{r} , su energía libre será $\Delta G_L[\mathbf{M}(\mathbf{r}); \mathbf{H}_a, T]$, donde $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ es su magnetización y \mathbf{H}_a un campo externo aplicado. Se asumirá que cada ΔV está a una temperatura fija muy por debajo de punto de Curie. Con estas condiciones, las contribuciones a la energía ΔG_L del volumen ΔV son:

-*Intercambio*. Aplicando las consideraciones de campo molecular a ΔV , cada uno estará caracterizado por una magnetización local $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ de intensidad igual a la magnetización espontánea $M_s(T)$. Por la isotropía del intercambio, en general se espera diferentes direcciones de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ para cada ΔV . Al tratar con temperaturas $T \ll T_c$, se vio en (2.110) que M_s solo será función de T , que además en este caso es fija, por lo que, la contribución del intercambio a la energía será constante ($\Delta F_{EX} = const. \Delta V$). Sin embargo, esta contribución no juega ningún papel a una temperatura fija y baja, pues se reduce a una mera restricción sobre $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, por la que su orientación puede cambiar de un punto a otro del espacio, pero su módulo está restringido al valor fijo M_s , pero cada vez que $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ cambia de orientación de un punto a otro, se tiene cierta desalineación de los momentos magnéticos vecinos, y esto cuesta más energía de intercambio. Entonces, la energía de intercambio estará presente solo cuando la dirección de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ varíe en el espacio, esto es, cuando los gradientes, $\nabla m_x, \nabla m_y, \nabla m_z$, del vector unitario $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r})/M_s$ sean diferentes de cero. Si la variación de \mathbf{m} de un punto a otro no es muy rápida, el término de orden más bajo en la densidad de energía consistente con una simetría cúbica (usualmente una buena aproximación para la mayoría de casos) es:

$$f_{EX} = const. + A(|\nabla m_x|^2 + |\nabla m_y|^2 + |\nabla m_z|^2) \quad (2.117)$$

-*Anisotropía*. La energía de anisotropía depende de la orientación relativa de la magnetización local $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ con respecto a ciertas direcciones privilegiadas. Si $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ indica el conjunto de ejes

privilegiados y de constantes de anisotropía locales, se puede expresar la energía de anisotropía de ΔV de la forma:

$$\Delta F_{AN} = f_{AN}[\mathbf{M}(\mathbf{m}); \mathbf{n}(\mathbf{r})] \Delta V \quad (2.118)$$

-*Energía magnetostática.* Es energía potencial de los momentos magnéticos en el campo creado por ellos. Por la ecuación (2.81) se sabe que la contribución de cada ΔV es:

$$\Delta F_M = -\frac{\mu_0}{2} \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{M} \Delta V \quad (2.119)$$

donde \mathbf{H}_M es la solución de (2.37). Cabe mencionar que esta ecuación podrá ser aplicada solo cuando se conozca la geometría del problema y se seleccione una distribución de magnetización $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ para todo el cuerpo, pues la relación entre \mathbf{H}_M y \mathbf{m} no es local.

-*Interacción con el campo aplicado.* Es energía potencial de los momentos magnéticos en el campo aplicado \mathbf{H}_a , y está dada por (2.69):

$$\Delta F_H = -\mu_0 \mathbf{H}_a \cdot \mathbf{M} \Delta V \quad (2.120)$$

La energía libre del cuerpo se obtiene integrando sobre todos los ΔV :

$$G_L[\mathbf{M}(\cdot); \mathbf{H}_a] = \int_V \left(A(\nabla \mathbf{m})^2 + f_{AN}(\mathbf{m}; \mathbf{n}) - \frac{\mu_0}{2} M_s \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{m} - \mu_0 M_s \mathbf{H}_a \cdot \mathbf{m} \right) d^3r \quad (2.121)$$

donde V es el volumen del cuerpo y $(\nabla \mathbf{m})^2 = |\nabla m_x|^2 + |\nabla m_y|^2 + |\nabla m_z|^2$. La notación $G_L[\mathbf{M}(\cdot)]$ es para recordar el hecho de que G_L no es una función de la magnetización en un punto específico, sino que es un funcional que depende de la propia dependencia de \mathbf{M} con \mathbf{r} . Por otra parte, para escribir esta ecuación es necesario asumir que existe el equilibrio termodinámico en cada ΔV incluso si globalmente el sistema no lo está. La descripción se completa con las ecuaciones magnetostáticas (2.37) y teniendo en cuenta que $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}_M = -\nabla \cdot (M_s \mathbf{m}) \quad \nabla \times \mathbf{H}_M = 0 \quad (2.122)$$

Los mínimos locales de G_L representan estados metaestables en los que el sistema tiende a permanecer por largos periodos de tiempo si la agitación térmica no es importante. En el límite de temperatura cero, el conjunto de todos los mínimos locales representa los estados posibles que el sistema puede ocupar bajo un campo externo dado. Para identificar los mínimos locales de energía, se podría representar G_L , pero esto implicaría una representación en el espacio de dimensión infinita de todos los posibles $\mathbf{M}(\cdot)$, lo que se hace una tarea imposible. Además, en un sistema de este tipo, el conocimiento del momento y del campo no será suficiente para identificar el estado del sistema, ya que en principio se espera que, para cualquier valor fijo del campo externo, existan muchas configuraciones de magnetización diferentes, caracterizadas por valores prácticamente idénticos del momento total.

2.4.2. Ecuaciones del micromagnetismo

La búsqueda de los mínimos locales es equivalente a una estimación variacional, donde se tienen que determinar aquellas configuraciones $\mathbf{M}(\cdot)$ tales que, cuando sean modificadas por una pequeña variación arbitraria $\delta \mathbf{M}(\cdot)$, se obtenga una variación positiva δG_L en la energía. Una vez se encuentre el conjunto de soluciones, se tendrá información completa de los estados metaestables existentes bajo un campo externo dado, que es la base para la descripción de las propiedades de histéresis del sistema.

2.4.2.1. Ecuaciones de Brown

Sea el campo efectivo \mathbf{H}_{eff} definido en cada punto dentro del cuerpo como:

$$\mathbf{H}_{eff} = \frac{2}{\mu_0 M_s} \nabla \cdot (A \nabla \mathbf{m}) - \frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial f_{AN}}{\partial \mathbf{m}} + \mathbf{H}_M + \mathbf{H}_a \quad (2.123)$$

este ejerce un torque sobre la magnetización que deberá ser cero (condición de estabilidad) en cada punto dentro del cuerpo para que el sistema esté en equilibrio. Es decir:

$$\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} = 0 \quad (2.124)$$

Si se descompone \mathbf{H}_{eff} en sus componentes paralela y perpendicular a \mathbf{m} , $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{||} + \mathbf{H}_{\perp}$, la condición de estabilidad es equivalente a imponer $\mathbf{H}_{\perp} = 0$, pues M_s es independiente del campo como se vio en (2.110). Las ecuaciones de Brown se completan con las condiciones de contorno para \mathbf{m} en la superficie del cuerpo:

$$\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad (2.125)$$

donde $\partial/\partial n$ indica la derivada en la dirección exterior normal a la superficie del cuerpo. Pero como el módulo de \mathbf{m} es constante, \mathbf{m} y su derivada son necesariamente perpendiculares, y la condición de contorno puede expresarse simplemente como:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad (2.126)$$

que es cero porque no se consideran los efectos de anisotropía en la superficie, que introducirían un torque adicional en la magnetización.

2.4.2.2. Minimización de la energía

Desde el punto de vista matemático, G_L es un funcional del vector $\mathbf{m}(\cdot)$, con la restricción de $|\mathbf{m}(\mathbf{r})| = 1$. Como se comentó al principio de la sección, la minimización de G_L es un problema variacional en el espacio 3D ocupado por el cuerpo, y de él se obtendrá el balance de fuerzas en el espacio (condición de equilibrio). Se parte de una configuración de magnetización dada $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ y se varía en cada punto por una cantidad pequeña arbitraria, de manera que:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \Rightarrow \mathbf{m}(\mathbf{r}) + \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \quad (2.127)$$

Ahora se calcula a primer orden la correspondiente variación de la energía funcional dada por (2.121):

$$\delta G_L = \int_V \left(2A \nabla \mathbf{m} \cdot \nabla \delta \mathbf{m} + \frac{\partial f_{AN}}{\partial \mathbf{m}} \cdot \delta \mathbf{m} - \mu_0 M_s \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{m} - \mu_0 M_s \mathbf{H}_a \cdot \delta \mathbf{m} \right) d^3 r \quad (2.128)$$

donde se ha explotado el hecho de que $\delta \left(\int_V \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{m} d^3 r \right) = \int_V \delta \mathbf{H}_M \cdot \mathbf{m} d^3 r + \int_V \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{m} d^3 r = 2 \int_V \mathbf{H}_M \cdot \delta \mathbf{m} d^3 r$. Empleando la identidad vectorial $\mathbf{a} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\phi \mathbf{a}) - \phi \nabla \cdot \mathbf{a}$ para cada término de $\nabla \mathbf{m} \cdot \nabla \delta \mathbf{m} = \nabla m_x \cdot \nabla \delta m_x + \nabla m_y \cdot \nabla \delta m_y + \nabla m_z \cdot \nabla \delta m_z$ e integrando el primer término de divergencia sobre todo el volumen, se llega a:

$$\begin{aligned} \delta G_L &= - \int_V \left(2 \nabla \cdot (A \nabla \mathbf{m}) - \frac{\partial f_{AN}}{\partial \mathbf{m}} + \mu_0 M_s \mathbf{H}_M + \mu_0 M_s \mathbf{H}_a \right) \cdot \delta \mathbf{m} d^3 r + 2 \oint_S A \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} \cdot \delta \mathbf{m} da \\ &= - \mu_0 \int_V M_s \mathbf{H}_{eff} \cdot \delta \mathbf{m} d^3 r + 2 \oint_S A \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} \cdot \delta \mathbf{m} da \end{aligned} \quad (2.129)$$

Sin embargo, para que la variación sea consistente con el hecho de que \mathbf{m} es un vector unitario, la variación tiene que ser del tipo:

$$\delta\mathbf{m} = \mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\theta} \quad (2.130)$$

donde $\delta\boldsymbol{\theta}$ es un vector pequeño y arbitrario que describe una pequeña rotación de \mathbf{m} alrededor del eje arbitrario con dirección la de $\delta\boldsymbol{\theta}$. Sustituyendo esto en (2.114) y con la identidad vectorial $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$ se llega a:

$$\delta G_L = \mu_0 \int_V M_s (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}) \cdot \delta\boldsymbol{\theta} d^3r - 2 \oint_S A \left(\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} \right) \cdot \delta\boldsymbol{\theta} da \quad (2.131)$$

Un extremo viene dado por $\delta G_L = 0$ para cualquier variación arbitraria $\delta\boldsymbol{\theta}$ lo que resulta exactamente en las ecuaciones de Brown (2.124) y (2.125). Para comprobar la estabilidad de una solución frente a pequeñas perturbaciones de la solución, bien se puede calcular la variación de δG_L a segundo orden o directamente verificar que $\delta G_L \geq 0$.

2.4.2.3. Dinámica y relajación

Las ecuaciones de Brown describen las condiciones bajo las cuales el sistema está en equilibrio, pero no dicen nada sobre como este alcanzará el equilibrio si inicialmente no lo está, o como reaccionará la magnetización frente a un campo aplicado que varía con el tiempo. La ecuación (2.21) mostraba la proporcionalidad entre el momento magnético elemental y su momento angular, $\mathbf{m}_i = \gamma \mathbf{J}_i$, que en el caso particular de que \mathbf{J}_i venga del espín del electrón, $\gamma = q_e/m_e$. Clásicamente, la tasa de cambio de \mathbf{J}_i está dada por el torque ejercido por el campo que actúa sobre \mathbf{m}_i (ec.(2.68)), es decir, $d\mathbf{J}_i/dt = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}$, por lo que se concluye que $d\mathbf{m}_i/dt = \gamma \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}$. En un medio magnético se espera una expresión similar para el $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$ de cada ΔV , solo que, por la presencia de las interacciones de intercambio, anisotropía y magnetostática, el torque sobre los momentos es ejercido por un campo efectivo \mathbf{H}_{eff} dado por (2.123). Se obtiene entonces:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma_G \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} \quad (2.132)$$

con $\gamma_G = \mu_0 \gamma$. Esta ecuación se reduce a la de Brown (2.124) cuando $\partial \mathbf{m}/\partial t = 0$. También predice que si \mathbf{m} no está inicialmente en equilibrio, empezará a precesar alrededor del campo y no alcanzará nunca el equilibrio, pues no tiene en cuenta los mecanismos de disipación que lo permiten. La ecuación de relajación permite introducir la disipación, y viene dada por:

$$\mathbf{H}_\perp - \alpha_G \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = 0 \quad (2.133)$$

o en su forma equivalente, por la misma razón que las ecuaciones (2.125) y (2.126):

$$\mathbf{m} \times \left(\mathbf{H}_{eff} - \alpha_G \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right) = 0 \quad (2.134)$$

donde $\alpha_G > 0$ y solo la componente perpendicular del campo puede estar involucrada, pues dada la restricción $|\mathbf{m}| = 1$, ningún cambio de \mathbf{m} puede tener lugar paralelamente a \mathbf{m} . Combinando (2.132) y (2.134), se obtiene una expresión general conocida como la *ecuación de Gilbert* y que tendrá en cuenta los procesos tanto de disipación como de precesión:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma_G \mathbf{m} \times \left(\mathbf{H}_{eff} - \alpha_G \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right) = \gamma_G \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} - \gamma_G \alpha_G \mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \quad (2.135)$$

La ecuación (2.132) es reconocida en el límite $\alpha_G \rightarrow 0$, mientras que, cuando $\alpha_G \rightarrow \infty$, $\partial \mathbf{m} / \partial t$ tiende a ser muy pequeño y se llega a la ecuación (2.133). Una ecuación equivalente a (2.135) y que también describe la dinámica, es la ecuación de *Landau-Lifshitz*, cuya forma es:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma_L \mathbf{m} \times (\mathbf{H}_{eff} - \alpha_L \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}) \quad (2.136)$$

donde $\gamma_L = \gamma_G / (1 + \gamma_G^2 \alpha_G^2)$ y $\gamma_L \alpha_L = \gamma_G \alpha_G \gamma_G / (1 + \gamma_G^2 \alpha_G^2)$.

2.4.3. Aplicaciones en biomedicina

La configuración multidominio de un material ferromagnético deja de ser energéticamente favorable a medida que el tamaño de las partículas de ese material disminuye. Se puede llegar hasta un tamaño nanométrico de las partículas ferromagnéticas en el que la configuración monodominio es la adecuada energéticamente y la magnetización en ausencia de un campo externo y la coercitividad son nulos (ver Figura 7.4 del Anexo 1). Se dice entonces que estas partículas son superparamagnéticas y sus aplicaciones en biomedicina es lo que se va a tratar en esta sección.

2.4.3.1. Propiedades de las nanopartículas magnéticas para su uso en biomedicina

Las aplicaciones de nanopartículas magnéticas (NPMs) en biomedicina se sustentan sobre tres propiedades básicas de estas: se sabe que pueden ser dirigidas por un campo magnético no homogéneo, como ocurre en la separación magnética¹ o la administración de fármacos y genes; pueden ser detectadas por el campo magnético local que crean, como sucede en la imagen por resonancia magnética (IRM), la imagen de partículas magnéticas (IPM) o la biodetección magnetorresistiva²; y pueden calentar su medio local por disipación, en presencia de un campo magnético de corriente alterna (CA) como ocurre en la hipertermia de fluido magnético. Estas propiedades se resumen en la Figura 2.7. Las NPMs empleadas en la experimentación *in vivo*³ están hechas casi exclusivamente de óxido de hierro superparamagnético (SPIONs) y recubiertas de manera que son: no tóxicas, biocompatibles, biodegradables, desencadenantes de una respuesta no inmune, no se eliminan con rapidez, no se asientan fuera de una dispersión y no forman grandes agregados. Las partículas o aglomeraciones de estas de un tamaño < 100 nm son generalmente tomadas por el sistema reticuloendotelial para su posterior eliminación, sin embargo, aquellas con un tamaño $> 5 \mu\text{m}$ pueden obstruir los capilares y desencadenar serios problemas de salud. Las partículas empleadas para aplicaciones *ex vivo*⁴ son generalmente perlas compuestas de polímeros de tamaño micrométrico que contienen una multitud de SPIONs. Un aspecto negativo a tener en cuenta es que a diferencia de los campos eléctricos, los campos magnéticos, empleados para las distintas aplicaciones que ofrecen las NPMs, sí tienen un mínimo efecto directo en la mayoría de procesos biológicos.

2.4.3.2. Superparamagnetismo

Por la anisotropía magnética de las NPMs, el momento magnético solo tiene dos posibles orientaciones antiparalelas entre ellas y separadas por una barrera de potencial cuya energía (KV)

¹La separación magnética es un proceso físico, que sirve para separar dos objetos (en la que uno debe ser ferroso o tener propiedades magnéticas y el otro no) a través del uso de separadores como imanes.

²Al acercar un objeto con un campo magnético propio a un sensor magnetorresistivo, cambia la resistencia eléctrica y se puede detectar el ángulo al que está el campo exterior (objeto) respecto al sensor.

³Se refiere a la experimentación realizada en un organismo vivo, como por ejemplo, pruebas con animales de laboratorio o ensayos clínicos realizados en pacientes.

⁴Se refiere a los experimentos o medidas realizados en o sobre tejidos biológicos de un organismo en un ambiente artificial fuera del organismo, con las alteraciones mínimas de las condiciones naturales.

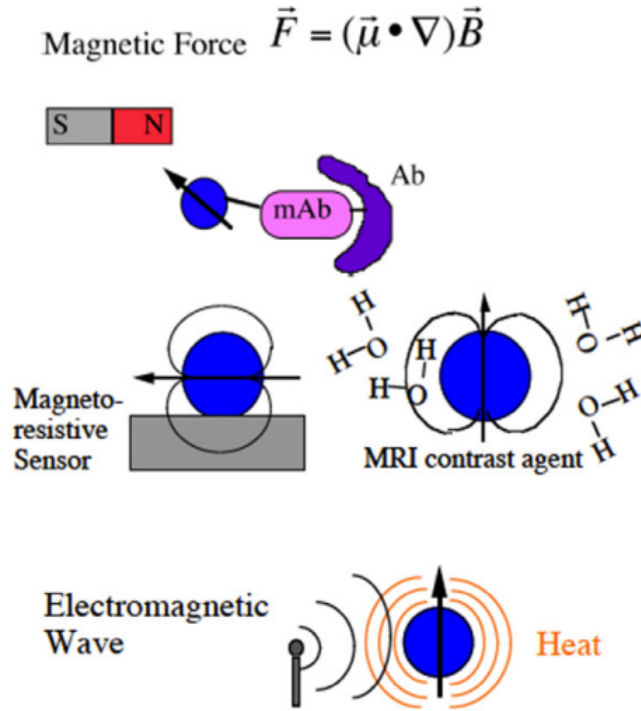


Figura 2.7: Nanopartículas magnéticas para su uso en biomedicina. *Imagen importada de [2].*

habrá que superar si se quiere cambiar la magnetización de un material. Reduciendo el tamaño de las partículas, el número de átomos por partícula decrece y la energía de intercambio puede alcanzar valores tan bajos como la energía térmica ($k_B T$) a temperatura ambiente, lo que conduce a una orientación espontánea y aleatoria del espín magnético dentro de las partículas debido precisamente a esa temperatura. Dicho de otra forma, la magnetización remanente y el campo coercitivo serán cero y no se observa histéresis, por lo que el material se comporta como uno paramagnético, aunque con una susceptibilidad mucho mayor en presencia de un campo externo. Este comportamiento se pudo observar para tamaños < 20 nm para el óxido de hierro, principalmente maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$), o para 3 nm en hierro puro. Este comportamiento de los materiales es lo que se conoce como *superparamagnetismo* y está caracterizado por un *tiempo de relajación* típico τ , que es el tiempo que necesitan los sistemas para alcanzar la magnetización cero, después de cesar el campo magnético externo:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{KV}{k_B T}\right) \quad (2.137)$$

donde τ_0 es el *tiempo característico* (10^{-9} s), K la densidad de energía de anisotropía (el valor para el óxido de hierro es de 20.000 J m^{-3}), V el volumen de la partícula, k_B es la *constante de Boltzmann* y T la temperatura. Entonces, el superparamagnetismo no dependerá solo de la temperatura, sino que, en ausencia de un campo externo, es necesario que $\tau_{medida} \gg \tau$ de manera que la magnetización neta de la NPMs esté cambiando repetidamente por la agitación térmica y en promedio sea cero.

2.4.3.3. Campos biomédicos de aplicación

-Imagen.

En las técnicas de IRM, el *tiempo de relajación longitudinal* T_1 refleja una pérdida de energía en forma de calor desde el sistema hacia la red vecina, y es principalmente una medida del

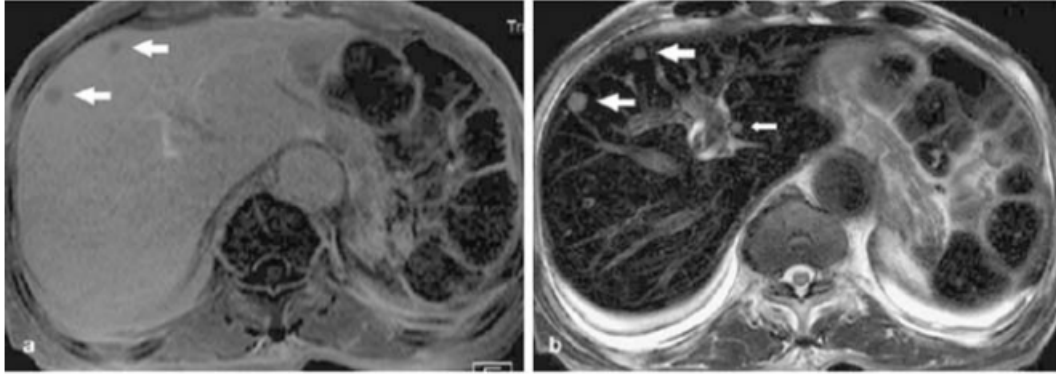


Figura 2.8: Metástasis hepática múltiple en un hombre de 48 años con carcinoma gástrico. Se puede ver como el uso de SPIONs mejora el contraste de las imágenes por MR: en la imagen *b* se han utilizado SPIONs y se muestra otra pequeña masa de alta intensidad, además de las dos masas que se ven en la imagen *a* en la que no se hace uso de los mismos. *Imagen importada de [3].*

acoplamiento dipolar de los momentos del protón con sus vecinos, mientras que el *tiempo de relajación transversal* T_2 está dirigido por la pérdida de coherencia de fase en la precesión de los protones debido a interacciones magnéticas con el resto y otros momentos fluctuantes en el tejido. La energía asociada con estos procesos se libera en forma de radiofrecuencias que producirán una señal eléctrica que será procesada para obtener una imagen de ella. Ambos parámetros pueden ser acortados usando agentes de contraste magnéticos, siendo los basados en SPIONs los más comunes, pues para las intensidades del campo magnético con las que se trabaja en IRM, los SPIONs estarán magnéticamente saturados, estableciendo así un sustancial campo dipolar localmente perturbador que conduce a un marcado acortamiento de T_2 junto con una menor reducción de T_1 . Esto es de gran interés en la detección de tumores, ya que el poco eficiente sistema reticuloendotelial de las células tumorales excluye la captación de los SPIONs, permaneciendo brillantes las anomalías en el tejido, mientras que los macrófagos en el tejido hepático sano sí los absorberán y el tejido sano se oscurece como se ve en la Figura 2.8. El transporte de la mayoría de agentes de contraste es por administración intravenosa, lo que determina el tamaño de las NPMs, pues deben ser capaces de pasar a través de la pared capilar vascular. El hígado y el bazo recogen rápidamente las NPMs con diámetros de aproximadamente 30 nm o más, mientras que aquellas con tamaños de aproximadamente 10 nm o menos no se reconocen tan fácilmente y, por tanto, tendrán una vida media más larga en el torrente sanguíneo y serán recolectadas por las células reticuloendoteliales de todo el cuerpo, incluidas las de los ganglios linfáticos y la médula ósea. Si las partículas no son capturadas completamente por el hígado y el bazo, la fagocitosis de SPIONs por los macrófagos será un potente marcador de zonas de inflamación en imágenes de placas ateroscleróticas por IRM. Otra aplicación en la IRM es el uso de dichas partículas para rastrear células madre trasplantadas a órganos como el cerebro.

-Entrega de fármacos.

Usando vehículos de administración de fármacos dirigidos como NP, se puede reducir la aparición de los efectos tóxicos que surgen tras un tratamiento de quimioterapia sistemático, pues el fármaco se puede llevar directamente al sitio del tumor, lo que limita el tiempo de exposición a tejidos y órganos sanos y también puede proteger a estos fármacos de una biodegradación



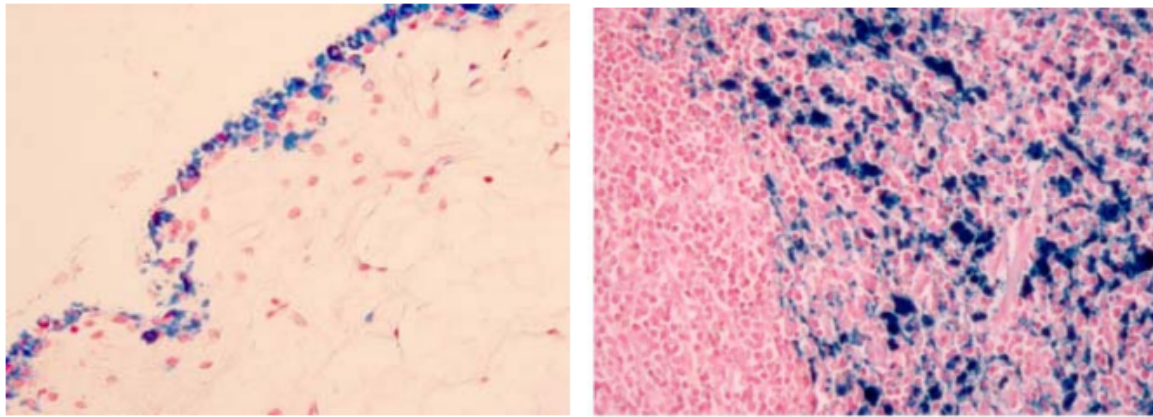
Figura 2.9: Las partículas son inyectadas en la articulación de la oveja y mantenidas en el lugar de inyección a través de imanes permanentes (NdFeB, 1.3 T). Para testear su influencia en experimentos in vivo, estos se realizaron con y sin los imanes extracorporales. *Imagen importada de [4].*

temprana, una vez ahí se liberará de forma controlada para prolongar el tiempo de acción. La mayoría de los agentes anticáncer se basan en liposomas, dendrímeros y nanoesferas que deben ser preparados para: proporcionar una entrega selectiva de fármacos genéticos; acumularse preferentemente en los tejidos tumorales; mejorar solubilidad (la mayoría de estos portadores se administran por vía intravenosa o intraarterial en forma de ferrofluidos); y tener el potencial para vencer la resistencia asociada con el agente anticancerígeno habitual. Las NPMs, que pueden también ligarse a los fármacos, tienen un valor adicional, ya que pueden quedar atrapadas en el sitio de destino por un campo magnético externo. Sin embargo, a día de hoy, poder dirigir las a cualquier célula, tejido o tumor en el cuerpo, no es algo realista, pues la fuerza magnética no es lo suficientemente alta para guiarlas a través del sistema sanguíneo. Los portadores suelen tener una de estas dos configuraciones estructurales: (i) un núcleo de partícula magnética (generalmente magnetita (Fe_3O_4) o maghemita) recubierto con un polímero biocompatible o (ii) un polímero biocompatible poroso en el que las nanopartículas magnéticas se precipitan dentro de los poros. El direccionamiento magnético de fármacos usando SPIONs como sistemas portadores, es atractivo para la aplicación en aquellas partes del cuerpo accesibles con campos magnéticos dirigidos que darán lugar a altos gradientes de campo localmente y, por tanto, una mayor fuerza magnética es ejercida sobre los SPIONs. Se han desarrollado SPIONs para la terapia de enfermedades en articulaciones en humanos y animales. Experimentos *in vitro* y *in vivo* en ovejas (ver Figura 2.9 y 2.10) demostraron una buena biocompatibilidad de los SPIONs y una fácil eliminación de los mismos. Además, se observó una mayor concentración de SPIONs en el tejido si se aplican los imanes permanentes extracorporales, aumentando las capacidades del tratamiento.

Con el objetivo de mejorar las limitaciones que supone la liberación del fármaco de su portador, se probó a dirigir radionucleidos vía portadores magnéticos. La gran ventaja de estos es que no necesitan que las células tumorales absorban el agente, sino que basta dirigir el radionucleido hasta una zona cercana al tumor para que la radiación que este libere afecte al tejido tumoral, sin necesidad de separarse de su portador magnético. Experimentos *in vitro* y en ratones, acoplado un portador magnético a un emisor β (Y-90), fueron satisfactorios y además se observó un incremento de la radioactividad si se usaba un campo magnético.

-Transfección genética.

Los resultados satisfactorios para la administración de fármacos, abrió el paso al uso de las



(a) SPIONs (azul) adherido y captado por las células sinoviales. (b) SPIONs en el bazo después de 3h de la inyección de la partícula en la articulación

Figura 2.10: Similar a los experimentos in vitro, se siguió la absorción de los SPIONs a lo largo del tiempo y las ovejas se sacrificaron a las 3, 24, 72 y 120 horas después de la inyección. *Imagen importada de [4].*

NPMs para la terapia génica. La superficie del portador magnético se recubre con un vector viral⁵ que lleva el gen terapéutico. Al mantener al portador en el sitio objetivo mediante campos magnéticos externos, el virus está en contacto con el tejido durante un período de tiempo más largo, lo que aumenta la eficiencia de la transfección y expresión génica. La tasa de transfección medida en comparación con la transfección no viral es mayor, sin embargo, se han observado efectos secundarios nocivos en su uso.

-Hipertermia.

Las partículas deben generar suficiente calor para lograr una temperatura del tejido de al menos 42°C durante 30 minutos más o menos, necesaria para que el cáncer sea destruido. El tejido circundante no está involucrado y, por lo tanto, este método es mucho más protector que otras terapias contra el cáncer en las que se destruirán grandes áreas de células o tejido. En la Figura 2.11 se puede observar el calentamiento preferencial de un tumor utilizando microesferas ferromagnéticas. Generalmente, una tasa de deposición de calor de 100 mWcm^{-3} será suficiente en la mayoría de casos. La frecuencia e intensidad del campo magnético de CA externo aplicado están limitadas por respuestas fisiológicas nocivas a campos magnéticos de alta frecuencia, como pueden ser: la estimulación de los músculos periféricos y esqueléticos, posible estimulación cardíaca y arritmia, y calentamiento inductivo no específico del tejido. Estudios con sistemas de calentamiento por corrientes de Eddy concluyeron que campos donde $\mathbf{H} \cdot f$ no excede $4.85 \times 10^8 \text{ Am}^{-1} \text{ s}^{-1}$ son seguros y tolerables. La cantidad de material magnético requerida para producir dichas temperaturas depende del método de administración, siendo una cantidad de 5-10 mg de material magnético concentrado en cada cm^3 de tejido tumoral apropiado para la hipertermia magnética en pacientes humanos. En este campo destaca la *hipertermia de fluido magnético*, donde las entidades magnéticas son superparamagnéticas, frente a la hipertermia con partículas ferromagnéticas, cuyas propiedades de histéresis permiten inducir calor cuando son sometidas a un campo magnético de CA. Las nanopartículas superparamagnéticas, generalmente SPIONs de magntita o maghemita por sus propiedades magnéticas apropiadas y su

⁵Un vector viral es un virus modificado que hace de vehículo para introducir material genético exógeno en el núcleo de una célula.

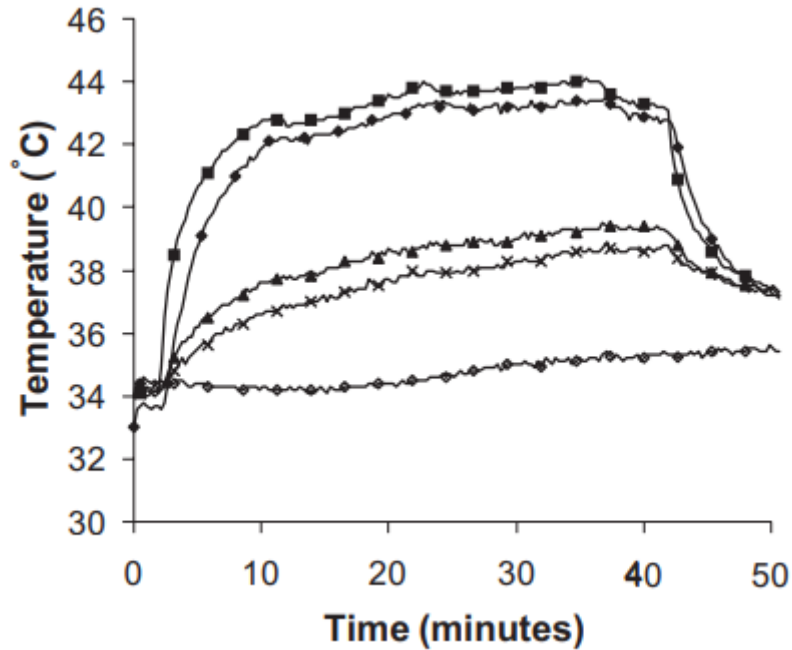


Figura 2.11: Datos de ensayos en animales sobre tratamientos de hipertermia en conejos, que muestran el calentamiento preferencial de un tumor utilizando microesferas ferromagnéticas infundidas por vía intravascular; (■) borde del tumor, (◆) centro del tumor, (▲) hígado normal a 1–2 cm del tumor, (×) lóbulo alternativo y (◇) temperatura corporal central. *Imagen importada de [5].*

compatibilidad biológica, son suspendidas en agua o un fluido de hidrocarburo para formar un ferrofluido, que cuando se aparta del campo magnético de influencia, su magnetización se relaja hasta volver a cero por la agitación térmica. La disipación de energía en forma de calor en un ferrofluido dependerá entonces de los mecanismos de relajación que pueden ser dos: la *rotación de Brown*, relacionada con la rotación física de las partículas dentro del fluido, y la *relajación de Néel*, relacionada con la rotación de los momentos magnéticos atómicos dentro de cada partícula quieta. Modelos como el de Debye, llevan a la comprobación de que usando partículas superparamagnéticas es posible producir más calor empleando campos más bajos en comparación con las partículas ferromagnéticas.

3. Micromagnetismo computacional

La búsqueda de diferentes formas de acelerar las simulaciones micromagnéticas ha sido incesante a lo largo de los años, pues muchos problemas demandan la simulación de una gran cantidad de grados de libertad. La mayoría de los esfuerzos hasta ahora han estado centrados en el desarrollo de métodos para un cálculo más eficiente del campo magnetostático propio, ya que es la parte que consume más tiempo en las simulaciones micromagnéticas. Las mejoras en la rapidez y capacidad de los ordenadores y el perfeccionamiento de los diferentes métodos computacionales, han llevado a un progreso significativo en las técnicas de miniaturización, haciendo más factible, y con un costo de tiempo menor, las simulaciones con dimensiones de dispositivos reales, llegando hasta la escala nanométrica.

Algunas áreas de investigación emergentes en nanomagnetismo (nano osciladores por transferencia de espín (STO), lógica de onda de espín, magnónica, caloritrónica de espín...), a menudo, requieren de simulaciones micromagnéticas con más de un millón de espines para ventanas temporales del orden de cientos de nanosegundos, lo que demanda una gran memoria y tiempo de consumo. A ello se debe el creciente interés en la ejecución de cálculos numéricos empleando la GPU en lugar de las unidades de procesamiento central (CPU), pues las primeras ofrecen una paralelización masiva a bajo costo. Sin embargo, el empleo de las GPUs requiere que los programas sean escritos específicamente para este hardware usando los lenguajes de programación que proporciona el fabricante y que además los algoritmos sean expresados en forma paralela, lo cual no siempre es una tarea fácil. En los últimos años, algunos grupos han desarrollado solucionadores para problemas micromagnéticos para este hardware, tanto por el método de las diferencias finitas (FD) como el de los elementos finitos (FE). Mumax³ es la herramienta micromagnética, basada en GPU de diferencia finita, que será empleada para las simulaciones en este trabajo.

3.1. Modelo básico

El micromagnetismo es una teoría para materiales ferro— y ferrimagnéticos que permite la computación de distribuciones arbitrarias de magnetización, asumiendo para ello que el módulo de la magnetización es constante ($\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$ con $|\mathbf{m}| = 1$) y que todas las cantidades vectoriales (magnetización, intercambio y campo desmagnetizante, especialmente) varían lentamente a la escala atómica. Como se vio en la Sección 2.4.2.3, la evolución temporal de la distribución de magnetización $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$ está dada por la ecuación de Gilbert (2.135), la cual se modifica, con el objetivo de facilitar su integración numérica, para llegar a:

$$(1 + \alpha^2) \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} + \alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff})] \quad (3.1)$$

donde $\gamma_0 = -\gamma_G = 2.21 \times 10^5 m A^{-1} s^{-1}$ es la *razón giromagnética* y $\alpha = -\gamma_G \alpha_G$ es el *parámetro adimensional de amortiguamiento de Gilbert*. Si se tiene en cuenta la anisotropía superficial y el intercambio entre capas en las condiciones de contorno dadas por (2.126), estas vendrán dadas por:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} = \frac{K_s}{A} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) [\mathbf{n} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{m}] - \left[\frac{J_1}{2A} + \frac{J_2}{A} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}') \right] \times [(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}') \mathbf{m} - \mathbf{m}'] \quad (3.2)$$

donde K_s es la *constante superficial de anisotropía*, J_1 y J_2 los coeficientes de intercambio superficial bilineal y bicuadrático respectivamente y \mathbf{m}' define la orientación de magnetización de la capa acoplada de referencia. Partiendo de una distribución de magnetización inicial $\mathbf{m}_0(\mathbf{r})$,

el formalismo consiste en integrar (3.1) en el tiempo, donde \mathbf{H}_{eff} está dado por (2.123), preservando las condiciones de contorno (3.2). Si no interesa la dinámica sino solo la distribución de magnetización en el equilibrio, basta resolver (2.124).

3.2. Discretización e integración numérica

El micromagnetismo requiere resolver ecuaciones íntegro-diferenciales no lineales, como lo son (3.1) y (2.123), que, salvo casos muy idealizados, no tienen solución analítica y deben resolverse numéricamente. Para hacer esto, la magnetización continua se muestrea en un número finito de puntos en una malla, convirtiéndose el campo ((3.1) y (2.123)) en un conjunto finito de ecuaciones acopladas simultáneamente, una por cada punto de malla. La discretización puede hacerse desde dos enfoques, por un lado, el enfoque FE, basado en la interpolación de la magnetización usando funciones de base lineal en una malla no uniforme, típicamente tetraédrica, y, por otro lado, el enfoque FD, que emplea una malla rectangular uniforme. Mumax³, que es el software usado en este trabajo, pertenece a este último grupo.

En general, el método FD es más fácil de implementar que el FE, pues su mallado es directo y el único aspecto a tener en cuenta es elegir un tamaño de celda más pequeño que la escala de longitud sobre la cual la magnetización cambia significativamente. Existen dos escalas de longitud características en micromagnetismo, la *longitud de intercambio* (l_{ex}), relevante cuando la interacción dipolar magnetostática es dominante sobre la anisotropía, como ocurre en los materiales magnéticos blandos, y la *anchura de pared* (l_w), relevante en materiales con gran anisotropía. Sus expresiones son:

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad l_w = \sqrt{\frac{A}{K}} \quad (3.3)$$

donde K es la *constante de anisotropía* del material. El rango de estos parámetros está entre 4 y 8 nm para la mayoría de los materiales ferromagnéticos usados frecuentemente.

Una vez decidido el mallado, se debe discretizar (2.123). Para las derivadas espaciales de la magnetización presentes en (2.123) y (3.2), se emplean expresiones basadas en una expansión de Taylor a segundo orden, mientras que para una función escalar arbitraria f , las expresiones para su primer y segunda derivada respecto a una coordenada espacial x son:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \quad (3.4)$$

donde h es el espaciado e i la celda respectiva a lo largo de la dirección x . Los términos locales, como la anisotropía y las componentes del campo \mathbf{H}_{app} , son discretizados trivialmente, mientras que el campo desmagnetizante se calcula asumiendo que \mathbf{m} es uniforme dentro de la celda, de manera que su promedio en la celda i se escribe como:

$$\mathbf{H}_{d,i} = -M_s \sum_j \mathbf{N}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{m}_j \quad (3.5)$$

donde la suma es sobre todas las celdas, \mathbf{r}_i define la posición de la celda i y $\mathbf{N}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ es el *tensor desmagnetizante*, un tensor simétrico 3 x 3. Obtenida la discretización, (3.1) es convertida en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas y la magnetización a lo largo del tiempo se obtendrá integrándolas simultáneamente en el tiempo.

3.3. Implementación en GPU. Mumax³

Aunque las GPUs originalmente fueron diseñadas para realizar los tediosos cálculos en paralelo requeridos para la representación de gráficos, durante los últimos años, han demostrado ser potentes plataformas informáticas en otros campos como las simulaciones físicas, ya que, dedican más transistores al procesamiento de datos que las CPU, reduciendo el tiempo de consumo y ejecución de hilos concurrentes dentro del procesador. CUDA (Compute Unified Device Architecture) es la plataforma de programación en paralelo de NVIDIA, que se encarga de la computación en la GPU proporcionando una interfaz simple para el programador. El lenguaje de programación estándar es Go, pero una serie de extensiones permite la programación en Python, Fortran, Julia o Java. El código es compilado por NVCC, el compilador para lenguaje C de NVIDIA.

Mumax³ es un paquete de software abierto para ejecutar simulaciones micromagnéticas en las GPU. Como ya se mencionó anteriormente, está basado en la discretización por el método FD. Posee además una interfaz gráfica que permite seguir la evolución temporal de la magnetización, así como, modificar los parámetros de la simulación en cualquier momento. Las salidas tienen las extensiones .txt (t, mx, my, mz) y .ovf (archivos para campos escalares y vectoriales), que se podrá graficar a través de los software SciDAVis y OOMMF respectivamente.

4. Simulaciones micromagnéticas

4.1. Test de validación. Standard problem 4

Mumax³, en su web oficial, ofrece una serie de problemas simples, de diferente naturaleza y con soluciones bien conocidas, con el objetivo de introducir al usuario al manejo de Mumax³ y a la interpretación de sus resultados. En este trabajo se tratará únicamente el conocido como *standard problem 4*, que se focaliza en los aspectos dinámicos de las simulaciones micromagnéticas.

Se considera una muestra ferromagnética rectangular de longitud $L = 500$ nm, ancho $d = 125$ nm, grosor $t = 3$ nm y parámetros típicos de un material permalloy ($A = 1.3 \times 10^{-11}$ J/m, $M_s = 8.0 \times 10^5$ A/m, $K = 0$). Se parte del estado de equilibrio (s-state) que se obtiene después de aplicar y reducir lentamente a cero un campo de saturación a lo largo de la dirección $[1, 1, 1]$. Se simula entonces la evolución temporal del sistema integrando la expresión (3.1) con $\alpha = 0.02$ una vez se ha aplicado un campo uniforme en el plano $x - y$. Las simulaciones se evaluarán para dos campos de diferente magnitud y dirección: el campo 1, de magnitud aproximada de 25 mT y dirigido 170° en sentido antihorario desde el eje x positivo, y el campo 2, de magnitud aproximada de 36 mT y dirigido 190° en sentido antihorario desde el eje x positivo. A la salida se obtendrá m_x, m_y, m_z de la magnetización promediada en el espacio como función del tiempo desde $t = 0$ hasta que la muestra alcanza el equilibrio en el nuevo campo, y una imagen de la magnetización cuando m_x cruza el cero por primera vez. Los resultados obtenidos se presentan a continuación.

Se representan los resultados obtenidos en simulaciones del standard problem 4 en Mumax³ para los tamaños de celda $3.125 \text{ nm} \times 3.125 \text{ nm} \times 3 \text{ nm}$, $2.5 \text{ nm} \times 2.5 \text{ nm} \times 3 \text{ nm}$ y $1.0 \text{ nm} \times 1.0 \text{ nm} \times 1.0 \text{ nm}$ y se comparan con los proporcionados por el NIST. En todos los casos, el tiempo de paso empleado en las simulaciones para este trabajo es ajustado óptimamente por Mumax³.

-Campo 1

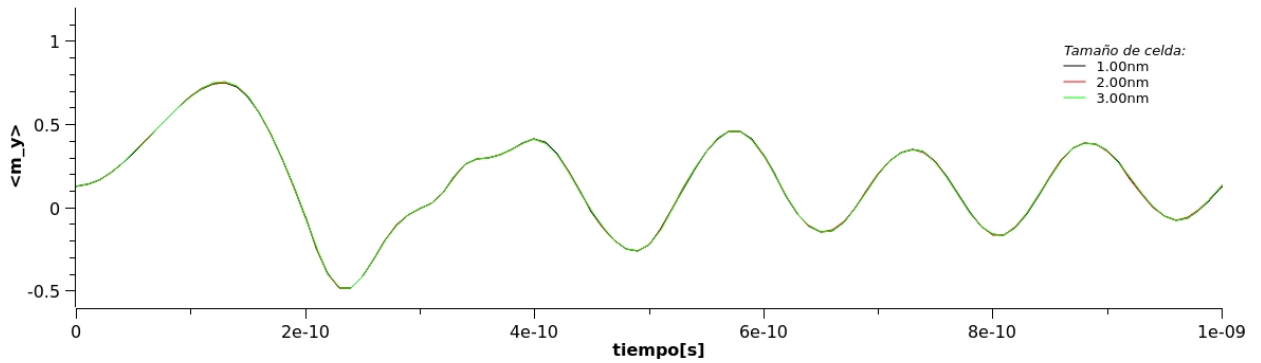


Figura 4.1: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje y cuando se aplica el campo 1 para diferentes tamaños de celda.

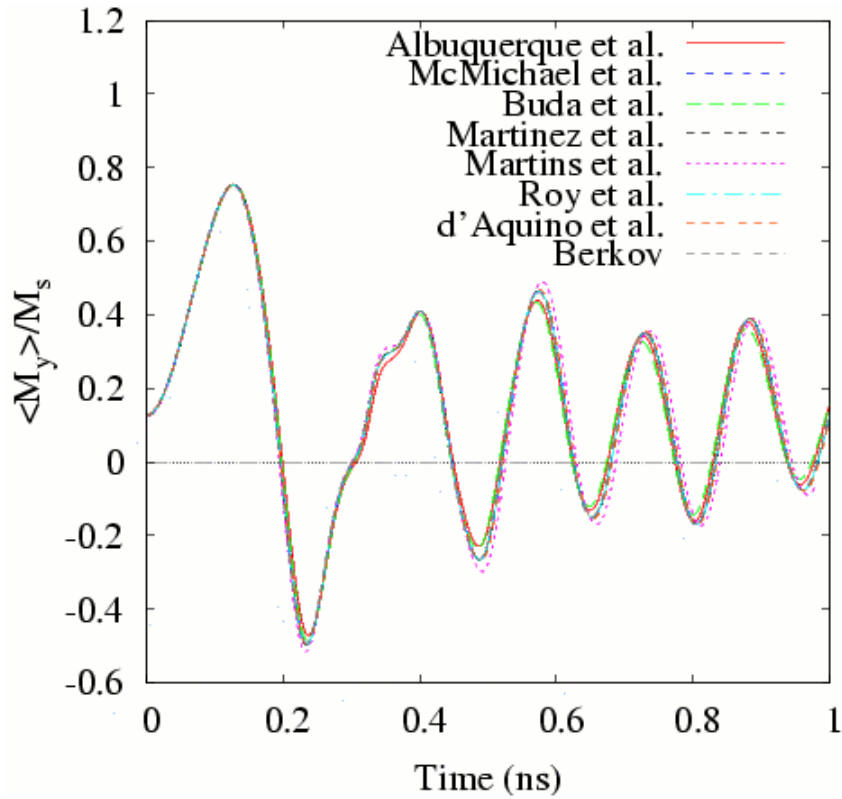


Figura 4.2: Comparación de los diferentes resultados obtenidos para el campo 1 por varios grupos de investigación para el NIST. *Imagen importada de [6].*

Como puede verse para el campo 1, la dinámica del sistema es prácticamente igual, independientemente de tamaño de la celda. Se pueden corroborar estos resultados comparando también las imágenes cuando $\langle m_x \rangle$ pasa por primera vez por cero.



Figura 4.3: Imagen de $\langle m_x \rangle$ cuando pasa por cero por primera vez para un tamaño de celda de 3.125 nm x 3.125 nm x 3 nm y aplicando el campo 1.

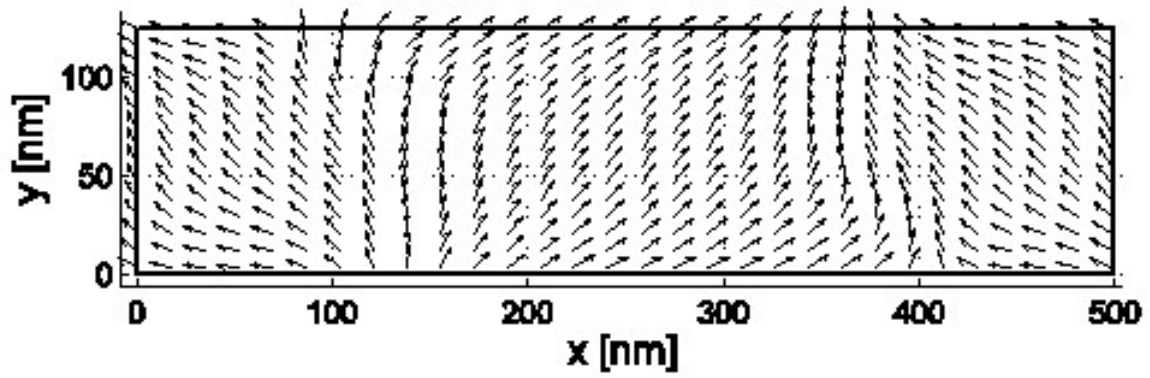


Figura 4.4: Imagen del NIST de $\langle m_x \rangle$ cuando pasa por cero por primera vez para un tamaño de celda de 3.125 nm x 3.125 nm x 3 nm y aplicando el campo 1. *Imagen importada de [7].*

-Campo 2

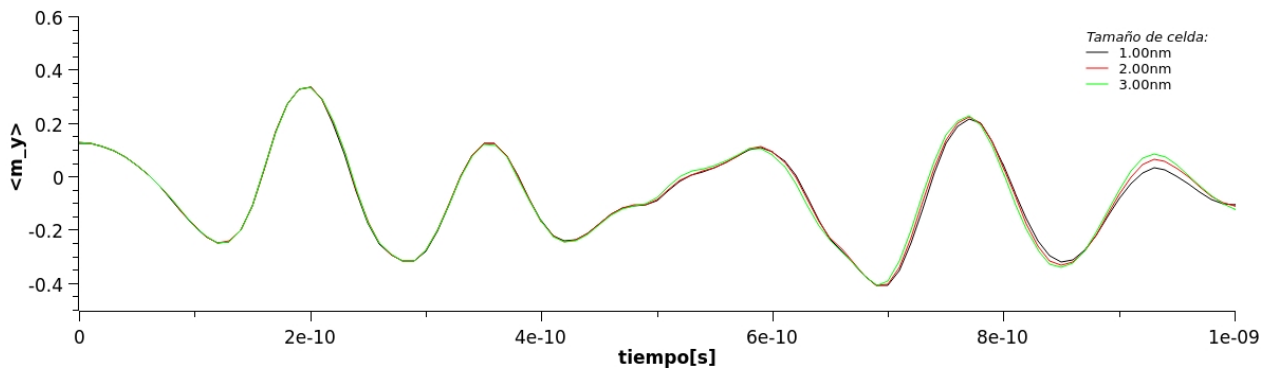


Figura 4.5: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje y cuando se aplica el campo 1 para diferentes tamaños de celda.

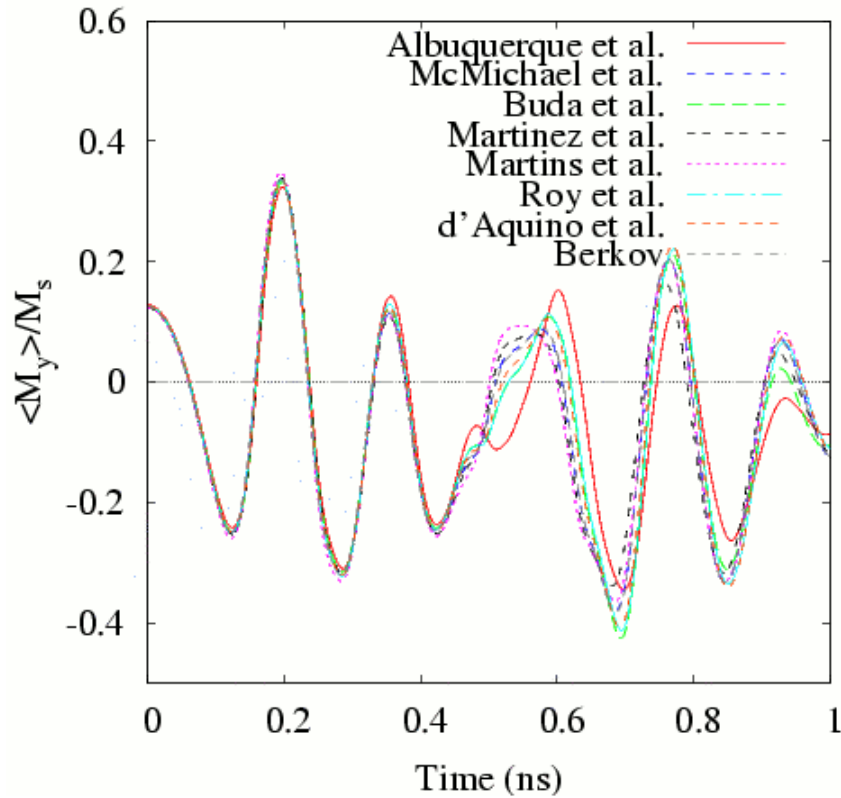


Figura 4.6: Comparación de los diferentes resultados obtenidos para el campo 2 por varios grupos de investigación para el NIST. *Imagen importada de [6].*

Los resultados obtenidos son también bastante cercanos a los proporcionados por el NIST, hasta aproximadamente 0.5 ns, momento en el cual las discrepancias por el tamaño de celda comienzan a hacerse visibles, como se puede ver en la Figura 4.7.

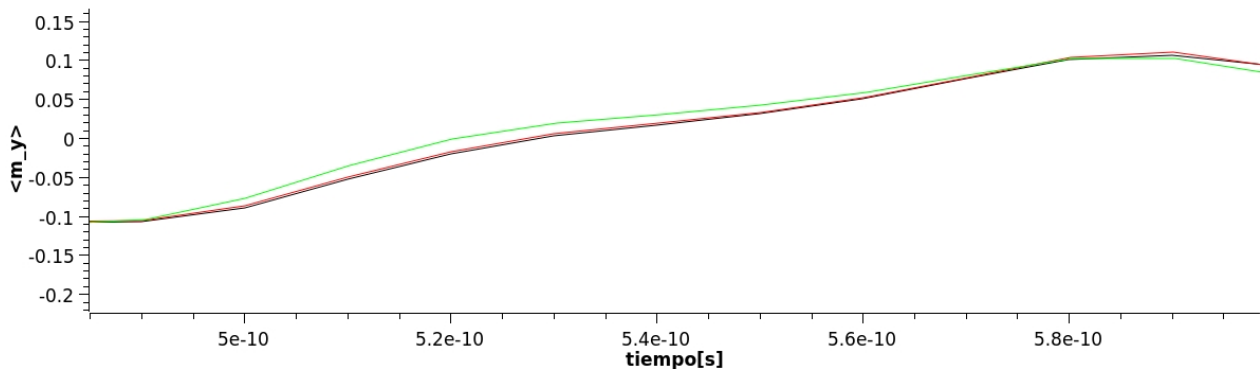


Figura 4.7: Ampliación de la Figura 4.5 para la mejor observación de las discrepancias a partir de 0.5 ns.

Una vez más comprábamos la compatibilidad de los resultados representados en la Figura 4.5 y 4.6, representando el momento en que $\langle m_x \rangle$ pasa por cero por primera vez. Con la simulación realizada se obtienen los resultados de la Figura 4.8, que son comparados de manera satisfactoria con los proporcionados por el NIST para una simulación de las mismas características.

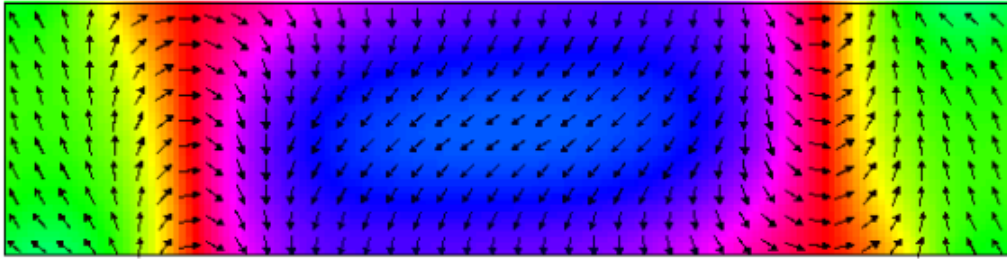


Figura 4.8: Imagen de $\langle m_x \rangle$ cuando pasa por cero por primera vez para un tamaño de celda de 3.125 nm x 3.125 nm x 3 nm y aplicando el campo 2.

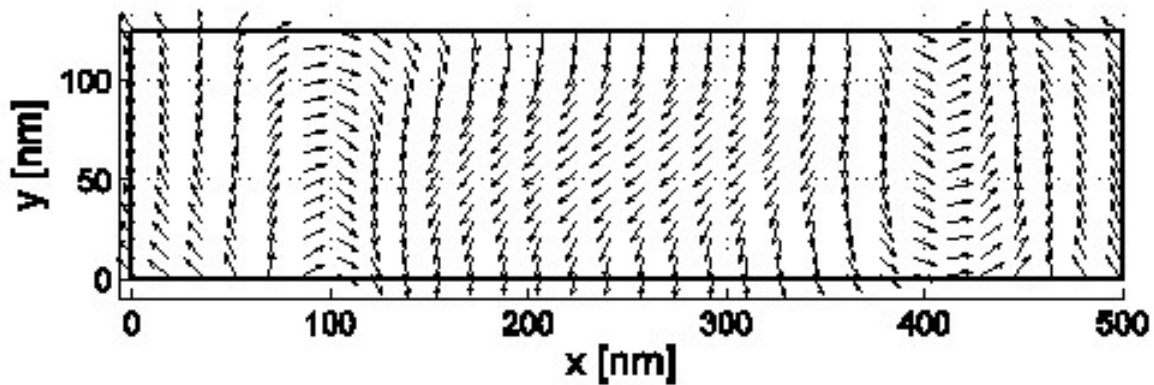


Figura 4.9: Imagen de $\langle m_x \rangle$ cuando pasa por cero por primera vez para un tamaño de celda de 3.125 nm x 3.125 nm x 3 nm y aplicando el campo 2. *Imagen importada de [7]*

4.2. Simulaciones con cuatro esferas superparamagnéticas

A la hora de preparar una muestra con SPIONs (síntesis y funcionalización) es importante tener en cuenta como estas interaccionarán entre ellas, pues interesa mantener en todo momento su comportamiento superparamagnético, que como se vio en la Sección 2.4.3.3, es de gran interés en las aplicaciones biomédicas. Por ello se va a considerar la interacción de cuatro esferas, empezando por la comprobación de que su comportamiento por separado es efectivamente superparamagnético. Se simula en Mumax³ una esfera de material permalloy de 40 nm de diámetro y discretizada en celdas de 2 nm × 2 nm × 2 nm y que, partiendo de una magnetización uniforme inicial a lo largo del eje z , es sometida a la acción de una temperatura de $T=300\text{K}$. El resto de parámetros se puede ver en el código especificado del Anexo 2.

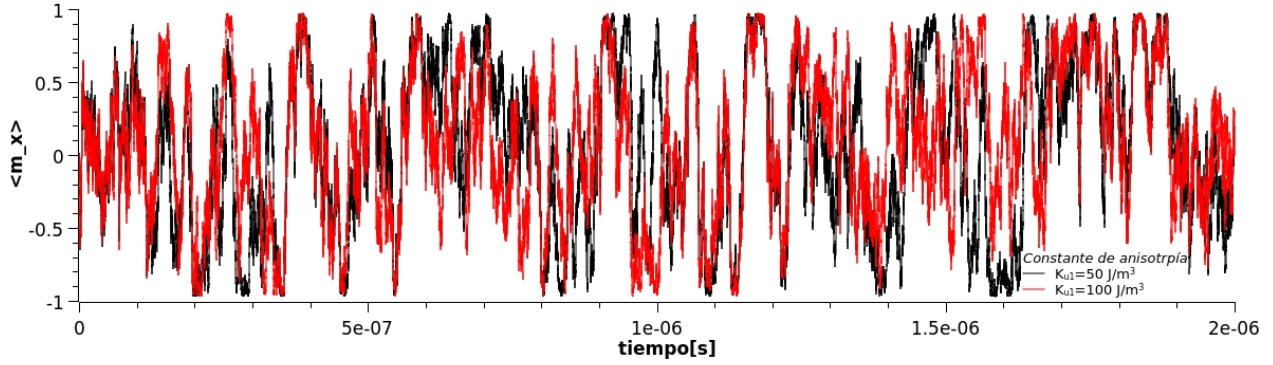


Figura 4.10: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje x cuando se aplica una temperatura de $T=300\text{K}$ sobre dos nanoesferas (individuales) donde el único parámetro diferente entre ellas es K_{u1} .

En la Figura 4.10 se puede apreciar como efectivamente las componentes de la magnetización de la muestra, en este caso la componente m_x , cambian rápidamente de manera que en promedio la magnetización será nula y efectivamente el comportamiento de las esferas es superparamagnético.

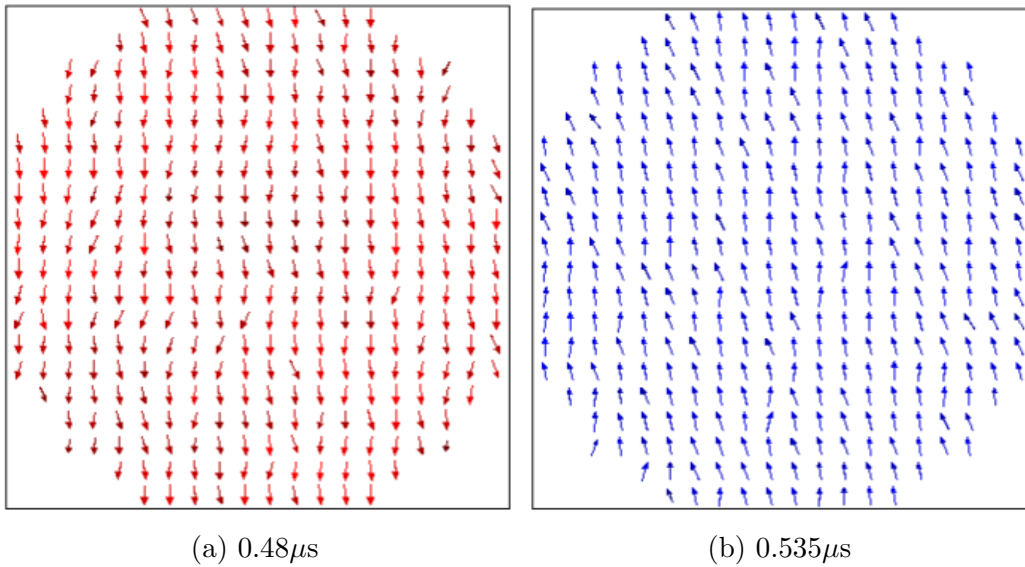


Figura 4.11: $\langle m_x \rangle$ en dos instantes de tiempo cercanos en la simulación de una nanoesfera con $K_{u1}=50\text{Jm}^{-3}$. El color azul marca la dirección positiva del eje z mientras que la roja marca la negativa.

Para evidenciar todavía más esto, en la Figura 4.11 se representó el cambio de orientación de la componente m_z en un intervalo de tiempo muy pequeño ($0.055\mu\text{s}$), mostrando que, efectivamente, el cambio de orientación de las componentes de magnetización es muy rápido, como se espera en un comportamiento superparamagnético.

Una vez averiguado el comportamiento individual de las esferas, se probará a hacer interactuar cuatro de ellas, cada una del mismo material y diámetro que antes, e igualmente discretizadas en celdas de $2 \text{ nm} \times 2 \text{ nm} \times 2 \text{ nm}$. Cada una ocupará una región del espacio, de manera que están dispuestas de tal forma que dos quedan sobre las otras dos (ver código correspondiente en

el Anexo 2 para más especificaciones). Además, para obtener una interpretación más valiosa de esta interacción, se harán cuatro simulaciones, en las que el único parámetro que variará será la distancia de separación d_s entre ellas: 10, 20, 30 y 40 nm. El sistema no estará sometido a un campo externo, sino a una interacción térmica de $T=300\text{K}$.

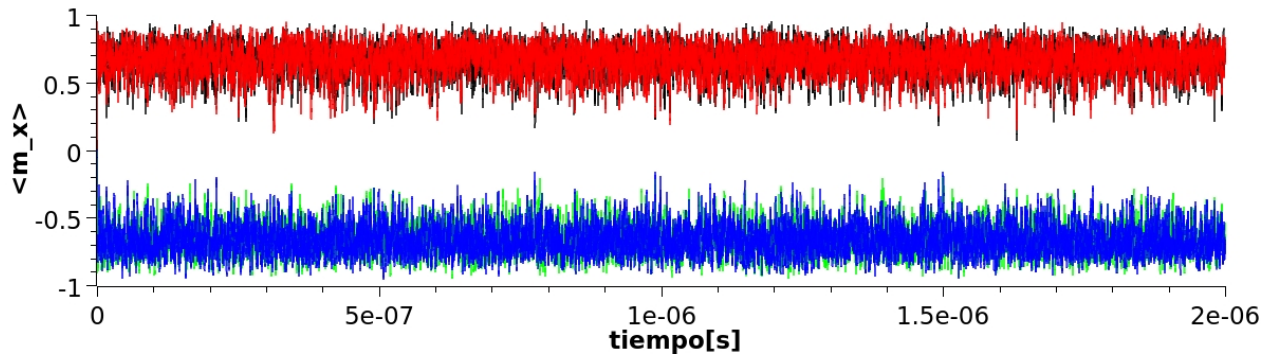


Figura 4.12: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje x cuando interactúan 4 nanoesferas separadas a una distancia de 10 nm. El color negro corresponde a la región de la esfera 1, el rojo a la esfera 2, el verde a la esfera 3 y el azul a la esfera 4.

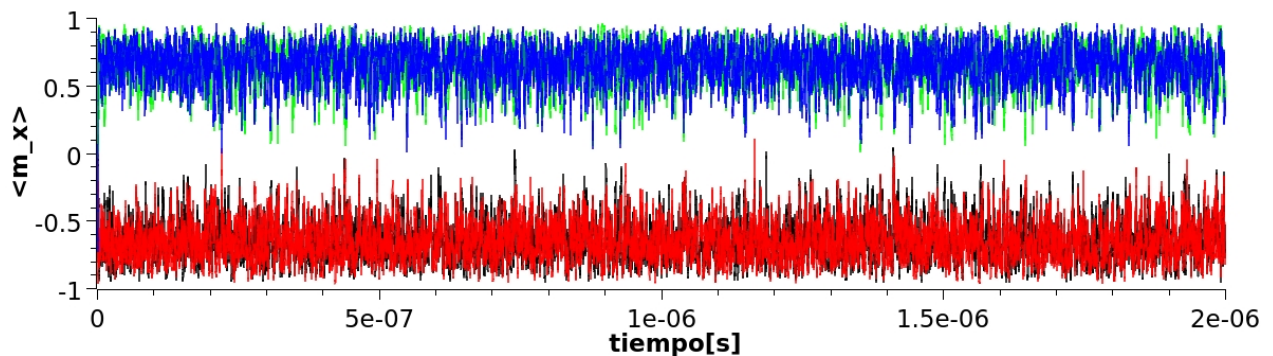


Figura 4.13: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje x cuando interactúan 4 nanoesferas separadas a una distancia de 20 nm. El color negro corresponde a la región de la esfera 1, el rojo a la esfera 2, el verde a la esfera 3 y el azul a la esfera 4.

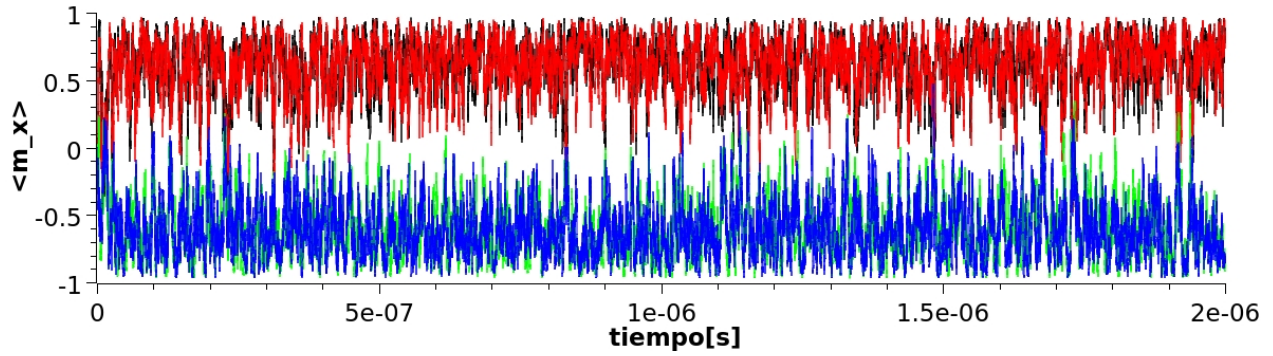


Figura 4.14: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje x cuando interactúan 4 nanoesferas separadas a una distancia de 30 nm. El color negro corresponde a la región de la esfera 1, el rojo a la esfera 2, el verde a la esfera 3 y el azul a la esfera 4.

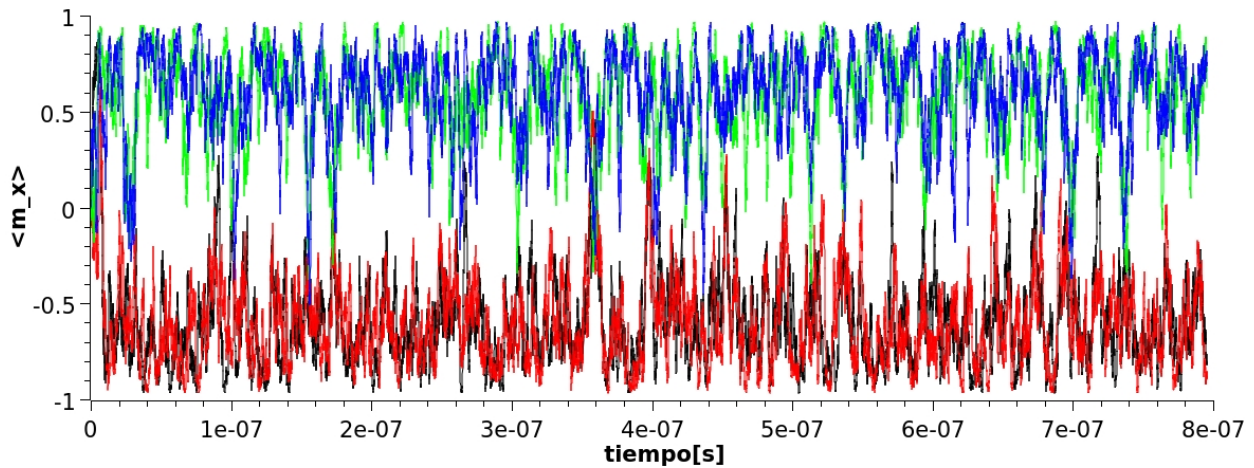


Figura 4.15: Evolución temporal de la magnetización promedio a lo largo del eje x cuando interactúan 4 nanoesferas separadas a una distancia de 40 nm. El color negro corresponde a la región de la esfera 1, el rojo a la esfera 2, el verde a la esfera 3 y el azul a la esfera 4.

Las distintas representaciones muestran como a medida que la distancia entre las nanoesferas es menor, las propiedades superparamagnéticas se pierden. Analizando los resultados, puede verse que para una separación de 10 nm, la componente $\langle m_x \rangle$ de la nanoesfera 1 (situada en la parte inferior izquierda) y de la nanoesfera 2 (situada en la parte inferior derecha) cambia de valor, pero siempre manteniéndose en valores negativos, mientras que para la nanoesfera 3 (situada en la parte superior izquierda) y la nanoesfera 4 (situada en la parte superior derecha) $\langle m_x \rangle$ hace lo propio, pero manteniéndose en valores positivos. Para la distancia de 20 nm, ahora es $\langle m_x \rangle$ de las nanoesferas 1 y 2 la que cambia entre valores negativos, mientras que la relativa a las nanoesferas 3 y 4 lo hace para valores positivos. El estado global del sistema en ambos casos es equivalente. Para la distancia de 30 nm las relaciones entre $\langle m_x \rangle$ de las nanoesferas 1 y 2 y 3 y 4 vuelven a ser como en el caso de una distancia de 10 nm, pero ahora con un cambio más pronunciado, pues en determinados momentos se alcanzan valores de $\langle m_x \rangle$ de signo contrario, positivo o negativo, evidenciando la aparición de un comportamiento superparamagnético. En el caso de 40 nm, los efectos anteriores se muestran todavía más, como puede observarse en el

cambio de signo de las cuatro componentes x de magnetización transcurrido un tiempo de $0.1 \mu s$ o $0.7 \mu s$ por ejemplo.

El tiempo de simulación para todos los casos fue de $2 \mu s$, aunque para 40 nm de distancia, transcurrido un mes, no logró alcanzarse dicho tiempo.

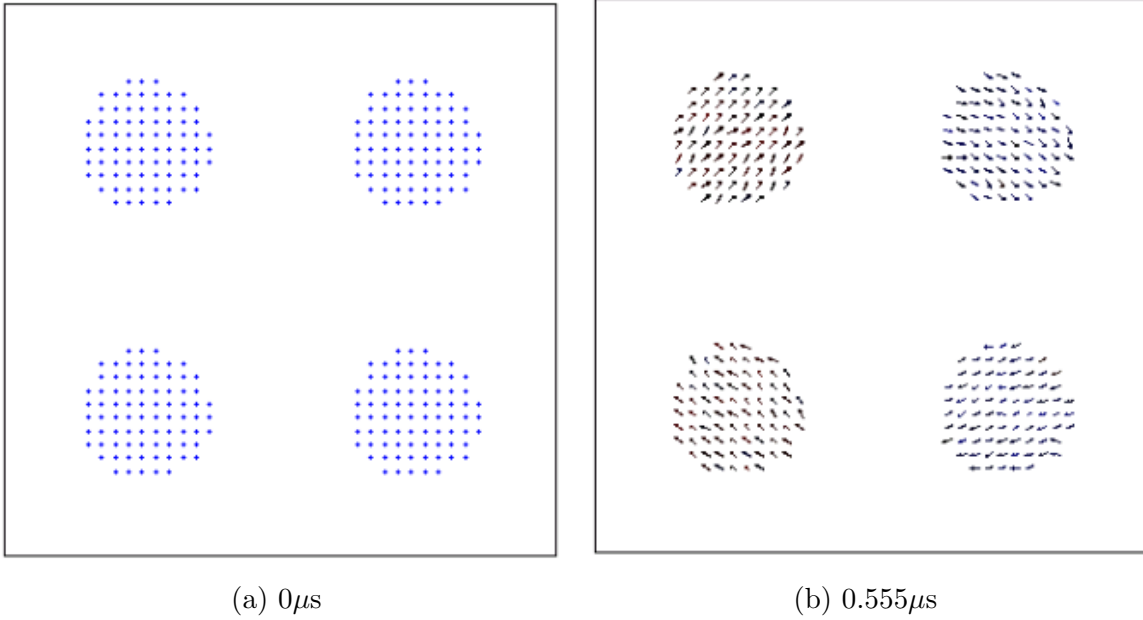


Figura 4.16: $\langle m_x \rangle$ en dos instantes de tiempo en la simulación de cuatro nanoesferas interaccionando y separadas 40 nm entre sí. El color azul marca la dirección positiva del eje z .

La Figura 4.16 muestra que la configuración más eficiente para este sistema, es decir, la que minimiza la energía libre del sistema, es la de vórtices. Un vórtice magnético se caracteriza por una distribución de espín de flujo cerrado en el plano con magnetización neta cero en ausencia de un campo magnético. En esta configuración, las energías de anisotropía e intercambio dominan sobre la magnetostática. Aunque la interacción dipolo-dipolo disminuye la estabilidad del estado del vórtice para pequeñas distancias de separación entre partículas, la magnetización que desaparece en la remanencia (si son partículas superparamagnéticas) es significativa porque reduce las fuerzas magnetostáticas de largo alcance responsables de la aglomeración de partículas.

5. Conclusiones/Conclusions

Se ha podido comprobar que las simulaciones micromagnéticas son de gran utilidad a la hora de resolver las ecuaciones no analíticas del Micromagnetismo, deducidas en el primer capítulo. El software Mumax³ utilizado para estas simulaciones, proporciona una interfaz simple que permitió un rápido entendimiento de su uso. Además, la salida que proporciona se pudo interpretar de manera clara y no hizo falta un software externo para su representación.

Los resultados para la simulación del standard problem 4 fueron comparados con los proporcionados por el NIST en la propia página web de Mumax³, de manera satisfactoria tanto para el campo 1 como para el campo 2, donde se pudo apreciar las discrepancias a partir de aproximadamente 0.5 ns producto del cambio en el tamaño de celda.

Adquirida cierta habilidad en el uso del software, se dispuso a simular la interacción entre cuatro nanoesferas superparamagnéticas. Para ello, primeramente se comprobó que el comportamiento de las mismas era superparamagnético, con resultados positivos tanto para una constante de anisotropía de 50 J/m³ como de 100 J/m³. Después, las simulaciones con cuatro nanoesferas a las distancias de 10, 20, 30 y 40 nm, mostraron que las propiedades superparamagnéticas se conservan a medida que la distancia entre ellas crece. El costo de tiempo de simulación limitó las simulaciones a distancias mayores.

Este tipo de simulaciones, aunque con un número muchísimo mayor de NPs evidentemente, pueden ser de utilidad a la hora de confeccionar un preparado con varias esferas magnéticas nanométricas para las aplicaciones biomédicas que se describieron. Pueden dar una idea de la distancia óptima de separación con el objetivo de evitar aglomeraciones de las mismas y conservar las propiedades superparamagnéticas, que en tratamientos de hipertermia, por ejemplo, permitirá aplicar simplemente radiofrecuencias para poder llegar a calentar la zona de interés y poder hacerlo en el momento y lugar que se desee, pues en ausencia de estas radiofrecuencias, las propiedades magnéticas se relajan.

It has been proven that micromagnetic simulations are very useful when solving the non-analytical equations of Micromagnetism, deduced in the first chapter. The Mumax³ software used for these simulations provides a simple interface that allows a quick understanding of its use. Furthermore, the output it provided could be interpreted clearly and no external software was required for its representation.

The results for the simulation of standard problem 4 were compared with those provided by NIST on the Mumax³ website, satisfactorily for both field 1 and field 2, where the discrepancies could be seen. from approximately 0.5 ns as a result of the change in cell size.

Having acquired some skill in using the software, he set out to simulate the interaction between four superparamagnetic nanospheres. To do this, it was first verified that their behavior was superparamagnetic, with positive results for both an anisotropy constant of 50 J/m³ and 100 J/m³. Then, simulations with four nanospheres at distances of 10, 20, 30 and 40 nm showed that the superparamagnetic properties are conserved as the distance between them increases. The cost of simulation time limited simulations to greater distances.

This type of simulations, although with a much larger number of NPs evidently, can be useful when preparing a preparation with several nanometric magnetic spheres for the biomedical

applications that were described. They can give an idea of the optimal separation distance with the aim of avoiding agglomerations and preserving the superparamagnetic properties, which in hyperthermia treatments, for example, will allow simply applying radio frequencies to be able to heat the area of interest and be able to do so. at the time and place desired, because in the absence of these radio frequencies, the magnetic properties relax.

6. Bibliografía y referencias

- [1] Giorgio Bertotti. "Hysteresis in Magnetism: For Physicists, Materials Scientists, and Engineers" (1998).
- [2] Robert L Stamps *et al* 2014 J. Phys. D: Appl. Phys. 47 333001."The 2014 Magnetism Roadmap".
- [3] Bárcena, C., Sra, A. K., & Gao, J. 2009 Nanoscale Magnetic Materials and Applications. Springer US. "Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine".
- [4] Hofmann-Antenbrink M, Hofmann H, Montet 2010 Swiss Med Wkly. "Superparamagnetic nanoparticles - a tool for early diagnostics".
- [5] Q A Pankhurst, J Connolly, S K Jones & J Dobson 2003 J. Phys. D: Appl. Phys. 36. "Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine".
- [6] Albuquerque *et al* (2000), Mc Michael *et al* (2000), Buda *et al* (2000), Martínez *et al* (2000), Martins *et al* (2001), Roy *et al* (2005), d'Aquino *et al* (2005) & Berkov (2007) for NIST.
- [7] d'Aquino *et al* (Dipartimento di Ingegneria Elettrica, Università degli Studi di Napoli, Nápoles-Italia.) 2005 for NIST.
- [8] J S Lee *et al* 2015 Scientific Reports 5 12135. "Magnetic multi-granule nanoclusters: A model system that exhibits universal size effect of magnetic coercivity".
- [9] L Lopez-Diaz *et al* 2012 J. Phys. D: Appl. Phys. 45 323001. "Micromagnetic simulations using Graphics Processing Units".

7. Anexo 1

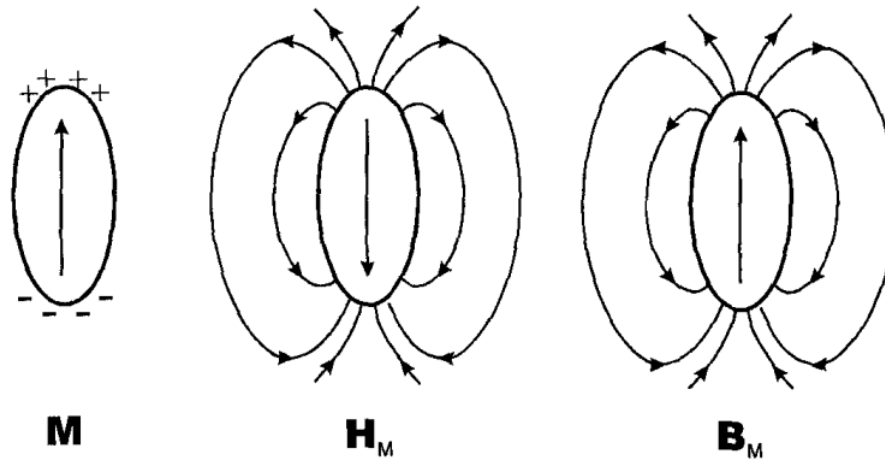


Figura 7.1: Magnetización, campo magnetostático e inducción para un elipsoide uniformemente magnetizado. *Imagen importada de [1] (Capítulo 3).*

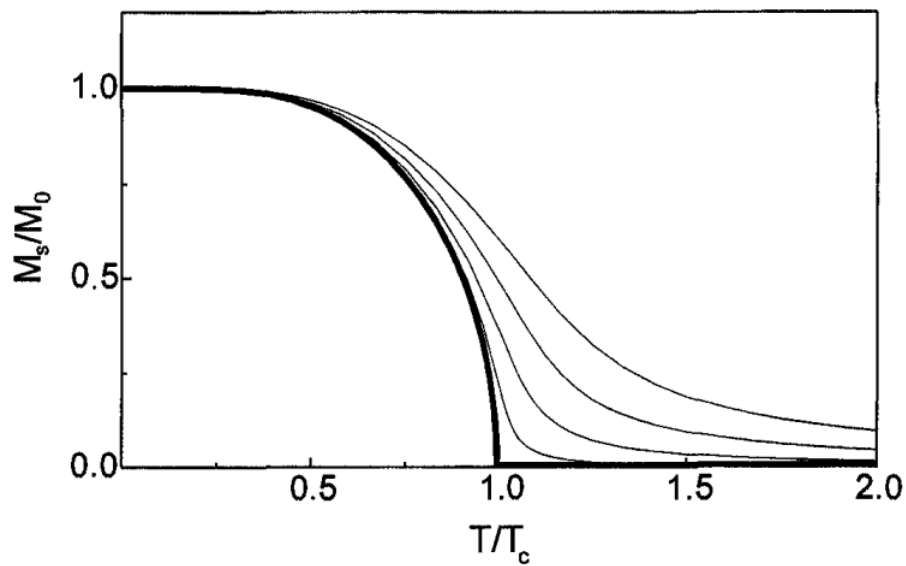


Figura 7.2: Solución de la ecuación (2.105) en ausencia de campo (línea gruesa) y en presencia de un campo $h_a = 0.005, 0.002, 0.05, 0.1$ con $h_a = H_a/N_W M_0$ (líneas finas). *Imagen importada de [1] (Capítulo 5).*

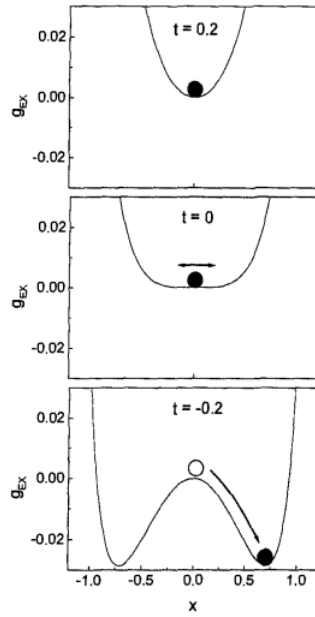


Figura 7.3: Solución de la ecuación (2.108) en 1D en el punto de Curie ($t=0$). *Imagen importada de [1]* (Capítulo 5).

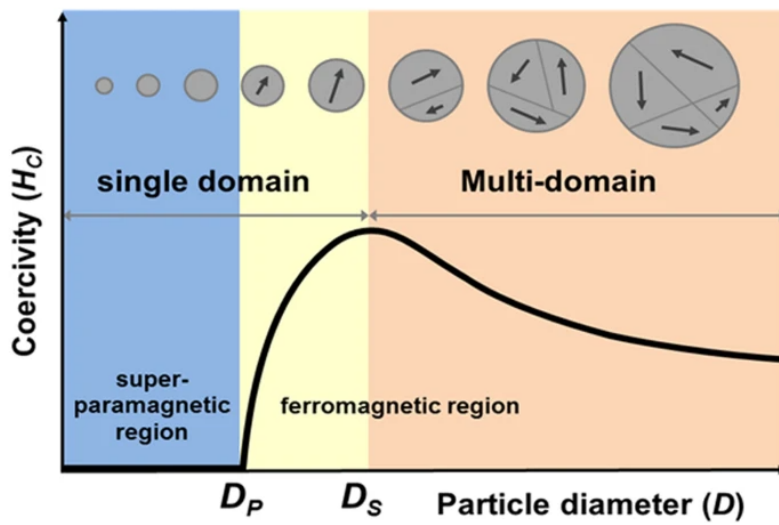


Figura 7.4: Esquema que muestra el comportamiento del campo coercitivo H_c de una partícula magnética como función de su diámetro D . *Imagen importada de [8]*.

8. Anexo 2

```
//parámetros de las celdas
SetGridsize(128, 32, 1)
SetCellsize(500e-9/128, 125e-9/32, 3e-9)

//parámetros del material
Msat = 800e3
Aex = 13e-12
alpha = 0.02

//magnetización inicial
m = uniform(1, .1, 0)
relax()
save(m) // relaxed state

//guardado de datos
autosave(m, 200e-12)
tableautosave(10e-12)

//campo externo de aplicación
B_ext = vector(-24.6E-3, 4.3E-3, 0)
run(1e-9)
```

Figura 8.1: Código Mumax³ para el standard problem 4.

```

//parámetros de celda
setGridSize(20, 20, 20)
SetCellsize(2e-9, 2e-9, 2e-9)
EdgeSmooth = 8
setgeom( ellipsoid(40e-9,40e-9,40e-9) )
saveas(geom, "sphere")

//parámetros del material
Msat = 297000
Aex = 1.0e-11
anisU   = vector(0, 0, 1)
Ku1     = 100.0
alpha = 0.5

//guardado de datos
autosave(m, 1.0e-9)
tableautosave(0.05e-9)

//m = randomMag(). magnetización inicial
m = uniform(0, 0, 1)

//minimize()
//save(m)

Temp = 300

run(2000e-9)
...

```

Figura 8.2: Código Mumax³ para la simulación de una nanoesfera superparamagnética.

```

//--- Set geometry spherical Permalloy particle---
//parámetros de celda
r := 20.0e-9
d := 2.0*r
ds :=30.0e-9
cx := 2.0e-9
Nx :=floor((ds+d)/cx)+1
Ny :=floor(r/cx)+1
SetGridsize(2*Nx, 2*Nx, 2*Ny)
SetCellsize(cx, cx, cx)

//disposición de las esferas
sphere1 := Ellipsoid(d, d, d).transl(-r-ds/2,0.0,0.0).transl(0.0,-r-ds/2,0.0)
sphere2 := Ellipsoid(d,d,d).transl(r+ds/2,0.0,0.0).transl(0.0,-r-ds/2,0.0)
sphere3 := Ellipsoid(d, d, d).transl(-r-ds/2,0.0,0.0).transl(0.0,r+ds/2,0.0)
sphere4 := Ellipsoid(d,d,d).transl(r+ds/2,0.0,0.0).transl(0.0,r+ds/2,0.0)
SetGeom(sphere1.add(sphere2).add(sphere3).add(sphere4))
//SetGeom(sphere1)

saveas(geom, "4Spheres")

defregion(1, sphere1) // left down
defregion(2, sphere2) // right down
defregion(3, sphere3) // left up
defregion(4, sphere4) // right up
save(regions)

//parámetros del material de cada esfera

//--- Sphere left down magnetic parameters-----
Material setRegion(1, 207000)

```

```

//--- Sphere left down magnetic parameters-----
Msat.setRegion(1, 297000)
Aex.setRegion(1, 1.0e-11)

//--- Sphere right down magnetic parameters-----
Msat.setRegion(2, 297000)
Aex.setRegion(2, 1.0e-11)

//--- Sphere left up magnetic parameters-----
Msat.setRegion(3, 297000)
Aex.setRegion(3, 1.0e-11)

//--- Sphere right up magnetic parameters-----
Msat.setRegion(4, 297000)
Aex.setRegion(4, 1.0e-11)

//constantes de interés para ec LLG
Ku1    = 1.0e2
anisU  = vector(0, 0, 1)
alpha  = 0.5 // damping de la ecuacion LLG

t1:=2000.0e-9

//-----Running-----//magnetización inicial
m = uniform (0, 0, 1)
Temp = 300

```

```

//--- Sphere right up magnetic parameters-----
Msat.setRegion(4, 297000)
Aex.setRegion(4, 1.0e-11)

//constantes de interés para ec LLG
Ku1      = 1.0e2
anisU    = vector(0, 0, 1)
alpha = 0.5 // damping de la ecuacion LLG

t1:=2000.0e-9

//-----Running-----//magnetización inicial
m = uniform (0, 0, 1)
Temp = 300

//guardado de datos
tableadd(m.Region(1))
tableadd(m.Region(2))
tableadd(m.Region(3))
tableadd(m.Region(4))

autosave(m, 1.0e-9)
tableautosave(0.05e-9)

run(t1)

```

Figura 8.3: Código Mumax³ para la simulación de cuatro nanoesferas superparamagnéticas.