

ПЛОТНОСТЬ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ГИББСА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

Р.А. Михайлюк, И.Л. Дорошевич

Аннотация. В статье представлены результаты расчета плотности свободной энергии Гиббса наночастиц железа сферической формы и ее компонент, который проводился с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag.

Ключевые слова: наночастица, микромагнитное моделирование, плотность свободной энергии Гиббса.

GIBBS FREE ENERGY DENSITY OF SPHERICAL IRON NANOPARTICLES

R.A. Mihaylyuk, I.L. Doroshevich

Abstract. The article presents the results of calculating the Gibbs free energy density of spherical iron nanoparticles and its components, which was carried out using the Nmag software package for micromagnetic modeling.

Keywords: nanoparticles, micromagnetic modeling, the Gibbs free energy density.

Магнитные наночастицы являются важнейшим элементом нового поколения изделий микро- и наноэлектроники, устройств для записи и хранения информации сверхвысокой плотности, биофункциональных наноматериалов, применяемых в диагностике, адресной терапии и др.

Ранее сообщалось [1], что равновесное распределение намагниченности в сферической наночастице железа определялось минимизацией ее свободной энергии E_{tot} , включающей в себя обменную энергию E_{exch} , магнитостатическую энергию E_{demag} , энергию одноосной магнитной анизотропии E_{anis} и энергию во внешнем магнитном поле E_{ext} . Расчет проводился на основе результатов, полученных с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag [2, 3], алгоритм которого основан на численном решении уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта. Данные результатов моделирования извлекались в текстовые файлы *plot.dat*, *_dat.ndt* и **.vtk* файлы. Визуализация векторных и скалярных полей проводилась просмотром данных **.vtk* файлов в программе MayaVi.

Распределение свободной энергии и ее компонент по объему наночастицы описывалось объемной плотностью обменной энергии $\mathcal{E}_{exch} = dE_{exch} / dV$, магнитостатической энергии $\mathcal{E}_{demag} = dE_{demag} / dV$, энергии одноосной магнитной анизотропии $\mathcal{E}_{anis} = dE_{anis} / dV$, энергии во внешнем магнитном поле $\mathcal{E}_{ext} = dE_{ext} / dV$ и свободной энергии $\mathcal{E}_{tot} = dE_{tot} / dV$.

В результате анализа скалярных полей компонент объемной плотности энергии было выявлено, что в состоянии однородной намагниченности распределение E_{demag} , E_{anis} и E_{ext} по объему частиц является практически равномерным, а значения E_{exch} очень малы. Обнаружено, что максимальное значение объемной плотности магнитостатической энергии $(E_{demag})_{max} = 606,8$ кДж/м³ наблюдается в состоянии однородной намагниченности частиц радиусом $R = 21$ нм при напряженности внешнего магнитного поля $H_{ext} = 200$ кА/м. В состоянии с вихревой магнитной структурой при $H_{ext} = 0$ пространственное распределение компонент объемной плотности энергии оказывается аналогичным для всех размеров ($R = 3 \div 25$ нм) исследуемых сферических наночастиц железа (за исключением распределения E_{anis} для $R = 13 \div 15$ нм), т. е. изоэнергетические поверхности соответствующих компонент объемной плотности энергии имеют практически одинаковую форму.

На Рисунке 1 изображены изоэнергетические поверхности объемной плотности обменной энергии \mathcal{E}_{exch} , магнитостатической энергии \mathcal{E}_{demag} и энергии одноосной магнитной анизотропии \mathcal{E}_{anis} сферической наночастицы железа $R = 25$ нм при $H_{ext} = 0$. Видно, что форма изоэнергетических поверхностей определяется не только типом компоненты, но и меняется в зависимости от ее величины.

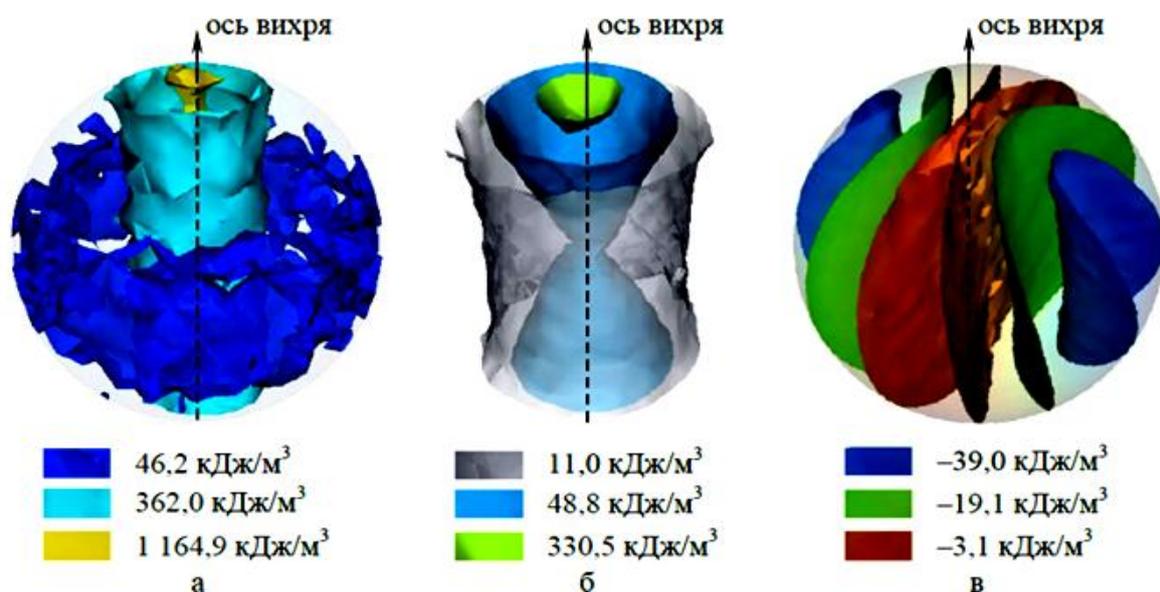


Рис. 1 – Изоэнергетические поверхности компонент объемной плотности обменной энергии (а), магнитостатической энергии (б), энергии одноосной магнитной анизотропии (в) сферической наночастицы железа $R = 25$ нм при $H_{ext} = 0$

При этом для всех компонент объемной плотности энергии наблюдается общая тенденция: изоэнергетические поверхности, соответствующие большим значениям объемной плотности энергии, более плотно прилегают к оси вихря. В отношении объемной плотности обменной энергии E_{exch} данный факт означает, что в примыкающих к оси вихря областях углы между векторами намагниченности \vec{M} соседних элементов (или углы между спинами ближайших соседних атомов) наибольшие. По мере удаления от оси они уменьшаются, а в точках на поверхности частицы в средней плоскости, перпендикулярной оси вихря, направления намагниченностей соседних элементов практически совпадают. Объемная плотность магнитостатической энергии имеет наибольшее значение $(E_{demag})_{max} \approx 560$ кДж/м³ на «магнитных полюсах» частицы, т. е. в точках пересечения ее поверхности с осью вихря, где направления векторов \vec{M} и \vec{H}_{demag} близки к противоположному, и величина напряженности размагничивающего поля максимальна. С удалением от «магнитных полюсов» E_{demag} быстро уменьшается и на расстояниях ~ 6 нм от них ее значение снижается в 2 раза.

На Рисунке 2 показаны зависимости от радиуса R частицы и проекции напряженности $(H_{ext})_x$ внешнего магнитного поля усредненных по всему объему частицы значений объемной плотности обменной энергии $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$, магнитостатической энергии $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$, энергии одноосной магнитной анизотропии $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$, энергии во внешнем магнитном поле $\langle \mathcal{E}_{ext} \rangle$ и свободной энергии $\langle \mathcal{E}_{tot} \rangle$. Из представленных данных видно, что в состоянии однородной намагниченности сферической наночастицы железа ее объемная плотность энергии определяется компонентами $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$, $\langle \mathcal{E}_{ext} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$, а вклад $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ пренебрежимо мал. При этом с ростом радиуса составляющая $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ увеличивается, а $\langle \mathcal{E}_{ext} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ от размера частицы не зависят. Компоненты $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ однородно намагниченной частицы от напряженности внешнего магнитного поля не зависят, а зависимость $\langle \mathcal{E}_{ext} \rangle$ от H_{ext} является линейной. При рассмотрении Рисунка 2 (а) в большем масштабе было определено, что с увеличением радиуса $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ проявляет тенденцию к уменьшению, а при уменьшении величины напряженности внешнего магнитного поля $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ увеличивается.

Последнее на наш взгляд связано с некоторым разупорядочением векторов намагниченности соседних элементов, появляющимся при снижении напряженности внешнего магнитного поля. В состоянии с вихревой магнитной структурой наблюдается значительное снижение компоненты $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ и резкое возрастание $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ по сравнению с однородным намагничиванием. С ростом размера частицы данные отличия увеличиваются и, например, для частицы $R = 25$ нм среднее значение объемной плотности магнитостатической энергии $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ в состоянии с вихревой магнитной структурой в 23 раза меньше, чем в состоянии с однородной намагниченностью, а $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ при этом увеличивается в $2,9 \cdot 10^6$ раз. Характер зависимости объемной плотности энергии одноосной анизотропии $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ от величины внешнего поля зависит от размера частиц, находящихся в состоянии с вихревой магнитной структурой. Для частиц радиусами от 13 до 16 нм максимум $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ приходится на $H_{ext} = 0$, а для $17 \text{ нм} \leq R \leq 30$ нм наблюдается два максимума $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$: при $(H_{ext})_x = \pm 50$ кА/м (для $R = 17 \div 23$ нм) и при $(H_{ext})_x = \pm 100$ кА/м (для $R = 23 \div 30$ нм).

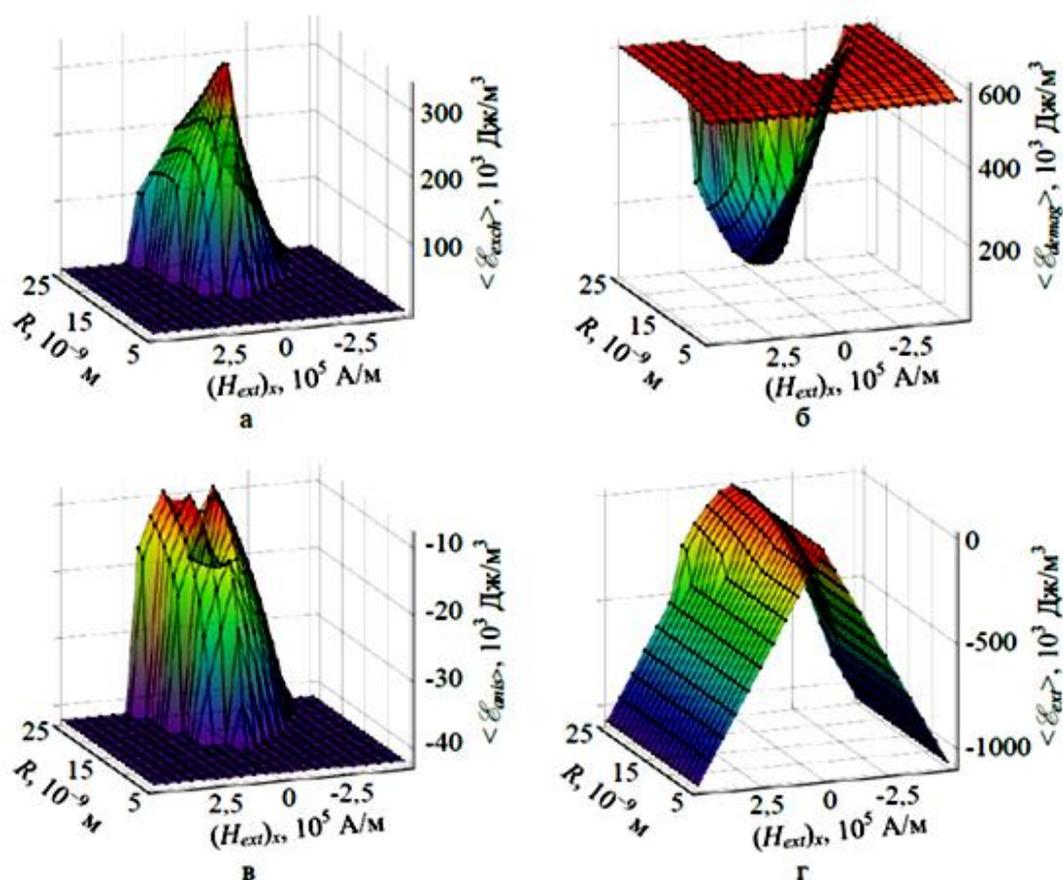


Рис. 2 – Зависимость среднего значения объемной плотности обменной энергии $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ (а), магнитостатической энергии $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ (б), энергии одноосной магнитной анизотропии $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ (в), энергии во внешнем магнитном поле $\langle \mathcal{E}_{ext} \rangle$ сферической наночастицы железа от ее радиуса и проекции напряженности внешнего магнитного поля

На Рисунке 3 представлена зависимость средних значений компонент объемной плотности энергии сферической частицы железа от ее радиуса при $H_{ext} = 0$. На графиках для $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$, $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ отчетливо выделяются 3 области, отличающихся формой кривых. В области $5 \text{ нм} \leq R \leq 12$ нм $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ практически не изменяются, а $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ с ростом радиуса увеличивается на 25 кДж/м³ и при $R = 12$ нм достигает своего максимального значения 595 кДж/м³. На участке $R = 12 \div 16$ нм все компоненты объемной плотности энергии испытывают резкое изменение: $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ уменьшается в 4 раза, $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ возрастает в 2,7 раза, а $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ увеличивается в $3,4 \cdot 10^5$ раз. При дальнейшем увеличении радиуса частицы ($16 \text{ нм} \leq R \leq 30$ нм) все компоненты $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$, $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ достаточно плавно уменьшаются. Зависимости на рисунке 3 находятся в хорошем согласии с данными работ [4; 5].

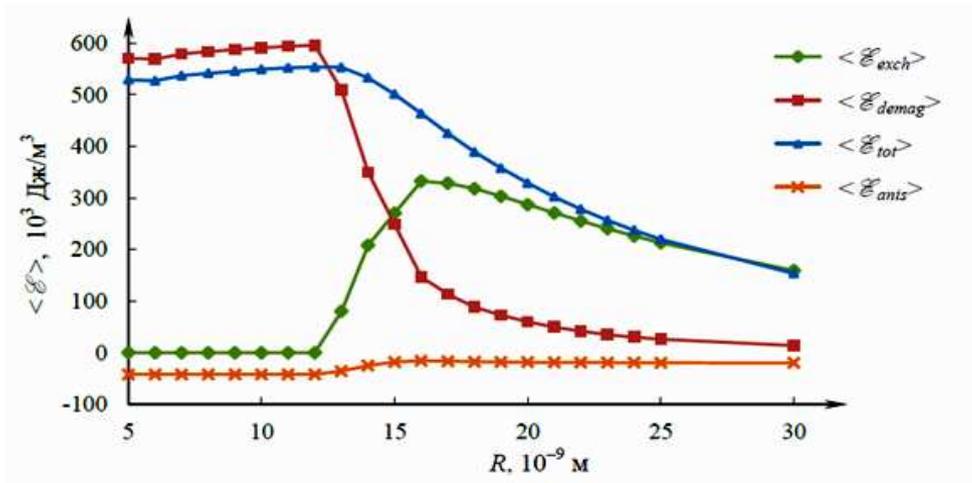


Рис. 3 – Зависимость среднего значения объемной плотности энергии и ее компонент сферической наночастицы железа от ее радиуса при $H_{ext} = 0$

Список использованных источников:

1. Михайлюк Р. А. Вихревая магнитная структура сферических наночастиц железа / Р.А. Михайлюк, И.Л. Дорошевич // Прикладные вопросы точных наук : материалы V Междунар. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов, преподавателей (АМТИ, г. Армавир, Россия, 30–31 октября 2021 г.) / отв. ред. Л.А. Горovenko ; техн. ред. Е.В. Коврига. – Армавир : РИО АГПУ, 2021. – С. 159–162.
2. A Systematic Approach to Multiphysics Extensions of Finite-Element-Based Micromagnetic Simulations: Nmag / T. Fischbacher [et al.] // IEEE Transactions on Magnetics. – 2007. – Vol. 43, № 6. – P. 2896–2898.
3. Горovenko Л.А. Математические методы компьютерного моделирования физических процессов// Международный журнал экспериментального образования. Пенза: ИД «Академия естествознания», 2017. – № 2. – С. 92–93.
4. Kákay, A. Monodomain critical radius for soft-magnetic fine particles / A. Kákay, L.K. Varga // Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 97, № 8. – P. 083901-1–083901-4.
5. Usov, N. A. Nonuniform micromagnetic structures in small ferromagnetic particles and thin films / N.A. Usov // Moscow International Symposium on Magnetism : Proceedings of International Symposium, Moscow, Russia, Jun. 20–24, 1999 / M.V. Lomonosov Moscow State University : in 2 parts. – Moscow, 1999. – Part 1. – P. 39–43.