

И.Л. Дорошевич

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

В статье представлены результаты расчета петель магнитного гистерезиса наночастиц железа сферической формы, который проводился с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag.

Ключевые слова: наночастицы, микромагнитное моделирование, магнитный гистерезис.

Введение. Ферромагнитные наночастицы имеют большие перспективы в области создания устройств магнитной записи и хранения информации сверхвысокой плотности, биофункциональных наноматериалов, применяемых в диагностике, адресной терапии, регенерации биологических тканей и др.

В качестве объектов исследования были выбраны изолированные ферромагнитные наночастицы железа сферической формы с радиусами от 5 до 30 нм. Данный выбор определялся двумя факторами: 1) железо является одним из основных ферромагнитных материалов, среди которых оно имеет самую большую распространенность в природе; 2) наибольшее значение критического радиуса R_0 сферической ферромагнитной частицы, при котором ее однородная намагниченность в процессе перемагничивания во внешнем магнитном поле сохраняется, полученное Е.И. Кондорским [1], для железа составляет 12,5 нм.

Исследование магнитных свойств сферических наночастиц железа проводилось в рамках континуальной модели и основывалось на созданном Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшицем фундаментальном подходе к описанию стационарных и динамических свойств ферромагнетиков на масштабах, значительно превышающих межатомные расстояния [2]. Указанный подход был развит W.F. Brown (Jn.), который сформулировал основные принципы и методы данного направления в теории магнетизма, получившего название микромагнетизм [3].

При этом магнитное тело разбивается на достаточно малые элементы (линейные размеры не должны превышать обменную длину), каждый из которых имеет однородную намагниченность, представляемую в виде $\vec{M} = \vec{m} \cdot M$, где M – величина вектора $\vec{M}$, $\vec{m}$ – единичный вектор намагниченности. В однородных образцах величина

намагниченности всех элементов считается одинаковой и равной намагниченности насыщения M_S , а ее направление ($\vec{m}$) при переходе от элемента к элементу может оставаться как постоянным, так и достаточно плавно изменяться, т. е. поворачиваться. Равновесное распределение намагниченности $\vec{M}(\vec{r})$ или $\vec{m}(\vec{r})$ в магнитном теле находят путем минимизации его свободной энергии, которая представляется в виде некоторого функционала от $\vec{M}$ (или $\vec{m}$).

Свободная энергия Гиббса E_{tot} включает в себя обменную энергию E_{exch} , магнитостатическую энергию E_{demag} , энергию кристаллографической анизотропии E_{anis} , энергию поверхностной анизотропии E_{anis}^{surf} , энергию во внешнем магнитном поле E_{ext} [3]:

$$E_{tot} = E_{exch} + E_{demag} + E_{anis} + E_{anis}^{surf} + E_{ext}, \quad (1)$$

В данной работе минимум свободной энергии (1), которому соответствует равновесное распределение намагниченности $\vec{M}(\vec{r})$ в сферических наночастицах железа, определялся решением уравнения временной эволюции намагниченности Ландау – Лифшица [2] с учетом диссипации и релаксационным слагаемым в форме Гильберта [4] (уравнение Ландау – Лифшица – Гильберта):

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\frac{|\tilde{\gamma}|}{1+\alpha^2} [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}] - \frac{|\tilde{\gamma}|\alpha}{(1+\alpha^2)M_S} [\vec{M} \times [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}]],$$

где $\tilde{\gamma}$ – гиромагнитное отношение электрона;

α – параметр затухания (феноменологический параметр диссипации);

$\vec{H}_{eff}$ – напряженность эффективного поля, являющегося вариационной производной

объемной плотности свободной энергии $\mathcal{E}_{tot} = \frac{dE_{tot}}{dV}$ по отношению к намагниченности $\vec{M}$:

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\delta \mathcal{E}_{tot}}{\delta \vec{M}}.$$

Гиромагнитное отношение электрона равно $\tilde{\gamma} = g \frac{\mu_0 e}{2m_e} = -2,21 \cdot 10^5 \text{ м/(А} \cdot \text{с)}$, для ферромагнетиков фактор $g = 2$, e – заряд электрона, m_e – его масса.

При динамическом подходе микромагнитный расчет состоит из следующих основных этапов. Исследуемый объект разбивается на элементы (ячейки счета), линейный размер которых меньше или сравним с обменной длиной. Затем для каждой ячейки счета задается начальное направление вектора намагниченности, вычисляется напряженность эффективного поля и решается уравнение Ландау – Лифшица – Гильберта до тех пор, пока по всему образцу отношение $\frac{[\vec{M} \times \vec{H}_{eff}]}{M_S^2}$ не станет меньше заданного

малого числа. При этом достигается условие локального минимума свободной энергии и $\frac{d\vec{M}}{dt} = 0$.

Методы и методология исследования. Поскольку расчет магнитной структуры трехмерного объекта требует самосогласованного интегрирования нелинейных дифференциальных уравнений для всех элементов, на которые разбивается тело, то одним из эффективных методов решения данной задачи является компьютерное моделирование.

Определение равновесного распределения намагниченности проводилось с помощью пакета микромагнитного моделирования Nmag с гибким методом конечных элементов с пользовательским интерфейсом на основе языка программирования Python [5]. Выбор данного программного обеспечения основывался на том, что этот пакет для проведения микромагнитных расчетов удовлетворяет требованиям, позволяющим решить поставленные задачи:

- метод конечных элементов применительно к геометрии сетки счета позволяет максимально корректно аппроксимировать шарообразную форму объектов исследования ячейками-тетраэдрами;
- алгоритм расчета пакета Nmag основан на численном решении уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта;
- микромагнитное моделирование позволяет определить не только распределение намагниченности, но и соответствующие различным энергетическим вкладам скалярные и векторные поля, из детального анализа которых можно получить информацию о базовых физических механизмах.
- возможность удобного вывода данных результатов моделирования и их визуализация.

Во всех микромагнитных расчетах, проводимых при температуре ниже температуры Кюри, использовались следующие значения параметров: намагниченность насыщения $M_S = 1,7 \cdot 10^6$ А/м, постоянная обменного взаимодействия $A = 2,1 \cdot 10^{-11}$ Дж/м, константа анизотропии $K_u = 4,2 \cdot 10^4$ Дж/м³, параметр затухания $\alpha = 0,5$. Построение пространственной сетки счета проводилось методом конечных элементов, средний линейный размер элементарной ячейки составлял $1 \div 3$ нм. При расчетах слагаемое E_{anis}^{surf} в свободную энергию в явном виде не входило, поскольку искажение локальной симметрии окружения ближайшими соседями поверхностных элементов сетки счета учитывалось при интегрировании уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта.

Данные результатов моделирования извлекались в текстовые файлы *plot.dat*, *_dat.ndt* и **.vtk* файлы. Построение петель гистерезиса по данным файлов *plot.dat* выполнялось в приложении Microsoft Office Excel.

Результаты исследования и их обсуждение. Начальная намагниченность сферических наночастиц железа всех размеров определялась как однородная и направленная по оси Ox , которая также являлась осью легкого намагничивания (ОЛН). Для получения петель гистерезиса внешнее магнитное поле прикладывалось вдоль оси Ox , а проекция его напряженности на Ox изменялась от 500 до -500 кА/м и обратно с шагом 50 кА/м.

На рисунке 1 представлены результаты расчетов петель гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов. Для частиц с радиусами $5 \div 12$ нм петли имеют одинаковую прямоугольную форму (сплошная линия). Начиная с радиуса 13 нм, вид кривой намагничивания меняется и с увеличением размера частицы принимает форму, характерную для процессов зарождения и эволюции вихревой магнитной структуры [6].

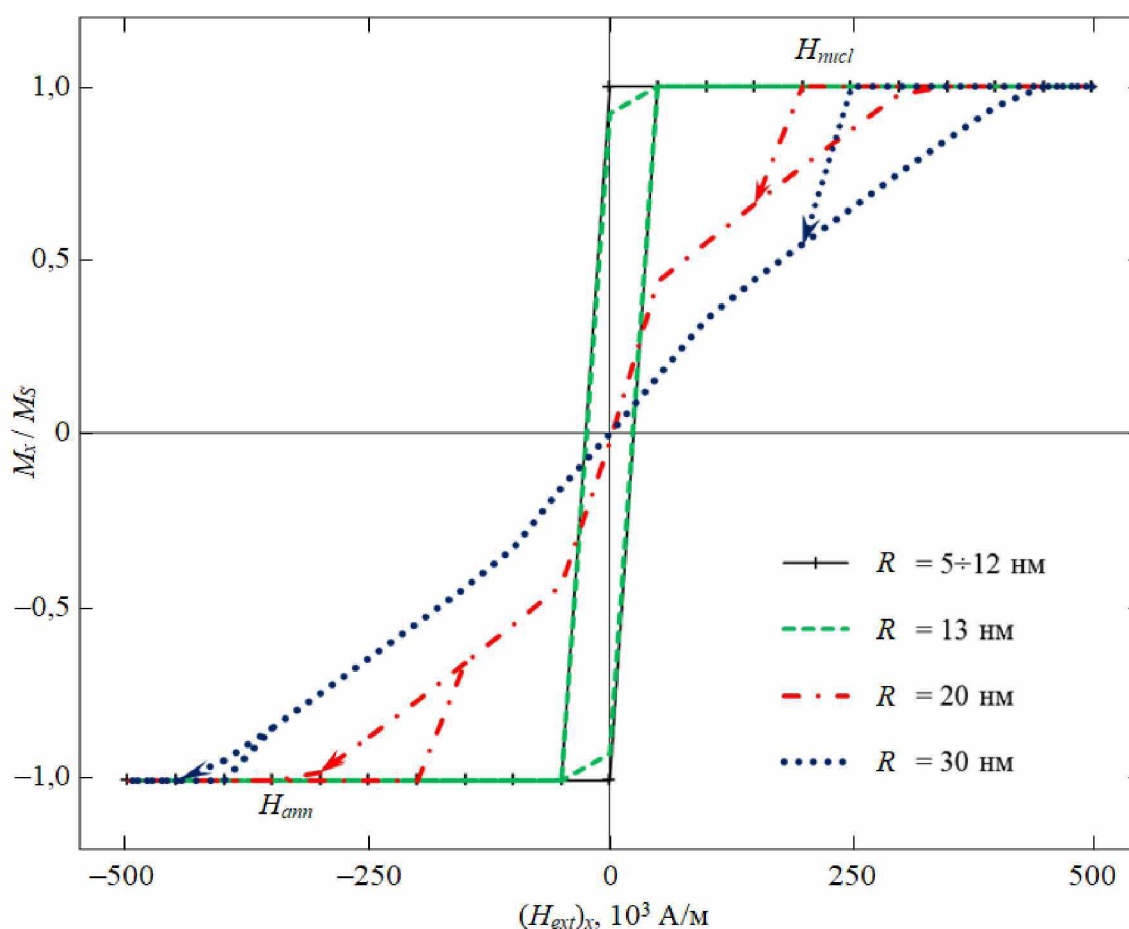


Рисунок 1 – Петли гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов

Из рисунка 1 видно, что для наночастиц железа с радиусами $5 \div 12$ нм коэрцитивная сила H_c составляет 25 кА/м. Полученное нами значение хорошо согласуется с теоретическим пределом коэрцитивной силы однодоменной сферической частицы с однородным вращением намагниченности [7] и для железа равным ~ 39 кА/м.

Значения x -компоненты приведенной остаточной намагниченности сферических наночастиц железа в зависимости от их радиуса приведены на рисунке 2. Видно, что на графике выделяются три области, в которых зависимость имеет разный характер: для частиц с радиусами от 5 до 12 нм значение $(M_r)_x/M_s = 1$, при $12 \text{ нм} \leq R \leq 16 \text{ нм}$ остаточная намагниченность резко уменьшается, а для $R \geq 16 \text{ нм}$ она практически равна нулю.

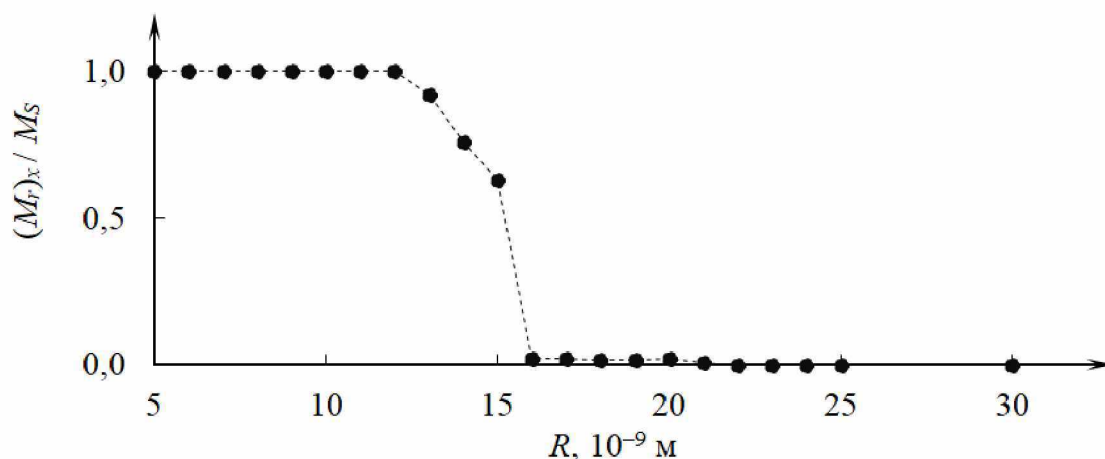


Рисунок 2 – Зависимость величины x -компоненты приведенной остаточной намагниченности ферромагнитной наночастицы железа сферической формы от ее радиуса. Штриховая линия добавлена для визуализации

Заключение. Полученные результаты свидетельствуют, что частицы с радиусами от 5 до 12 нм сохраняют состояние однородного намагничивания, а изменение направления намагниченности в переключающем поле на противоположное осуществляется когерентным поворотом. При радиусах, превышающих 12 нм, изменение внешнего поля приводит к нарушению однородной намагниченности частицы, возникновению и развитию вихревой магнитной структуры.

Для частиц, размеры которых сопоставимы с шириной доменной стенки и обменной длиной для данного материала, минимизация свободной энергии обеспечивается не разбиением материала на домены (как это имеет место в макрообразцах), а формированием вихревой структуры, уменьшающей собственное магнитное поле частицы в ее окрестности.

Список использованных источников

1. Кондорский, Е.И. Природа высокой коэрцитивной силы мелкодисперсных ферромагнетиков и теория однодоменной структуры / Е.И. Кондорский // Известия академии наук СССР, серия физическая. – 1952. – Т. 16, № 4. – С. 398–411.
2. Ландау, Л.Д. К теории дисперсии магнитной проницаемости ферромагнитных тел / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // Л. Д. Ландау : Собрание трудов : в 2 т. – М., 1969. – Т. 1. – С. 128–143.
3. Браун, У.Ф. Микромагнетизм / У.Ф. Браун ; пер. А.Г. Гуревича. – М. : Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 160 с.
3. Gilbert, T.L. A Lagrangian formulation of gyromagnetic equation of the magnetization field / T.L. Gilbert // Physical Review. – 1955. – Vol. 100, № 3. – P. 1243–1246.
4. 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.

5. Adeyeye A.O. Large area patterned magnetic nanostructures / A.O. Adeyeye, N. Singh // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2008. – Vol. 41, № 15. – P. 153001-1–153001-29.

6. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства / С.П. Губин [и др.] // Успехи химии. – 2005. – Т. 74, № 6. – С. 539–574.