

УДК 537.62.001

О СТЕПЕНЯХ СВОБОДЫ НАМАГНИЧЕННОСТИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ

© 2013 г. *А.А. Иванов, В.А. Орлов**

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

* Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева,
г. Красноярск, Россия

orlhome@rambler.ru

Обсуждается вопрос о правомерности и ограничениях широко применяемой одноугловой модели в численном описании распределения намагниченности в одномерных и квазиодномерных системах. Рассматриваются частные случаи магнитных систем, в которых применение двухугловой модели численного анализа обязательно. Предложены общие выражения гамильтониана для моделирования намагниченности нанопроволок в обеих моделях.

Ключевые слова: нанопроволока, распределение намагниченности, доменная стенка.

ABOUT DEGREES OF FREEDOM OF MAGNETIZATION AT MODELLING OF MAGNETIC STRUCTURE QUASI-ONE-DIMENSIONAL SYSTEMS

*A.A. Ivanov, V.A. Orlov**

Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

* Astaf'ev Krasnoyarsk State Pedagogical University, Krasnoyarsk, Russia

The question on legitimacy and restrictions of widely applied one-angular model in the numerical description of distribution of magnetization in one-dimensional and quasi-one-dimensional systems is discussed. Special cases of magnetic systems, in which application of two-angular model of the numerical analysis necessarily are considered. The general expressions hamiltonian for magnetization modelling nanowires in both models are offered.

Key words: nanowire, magnetization distribution, domain wall.

1. Введение

В последние годы не ослабевает интерес к исследованию наноразмерных квазиодномерных поликристаллических систем. Это внимание подогревается их перспективными свойствами для конструирования сверхплотных магнитных носителей информации, датчиков и пр. Модификации таких систем разнообразны: наноленты (страйпы), нанопроволоки, ферромагнитные зерна, инкапсулированные в нанотрубки массивы наноточек и др. На магнитные свойства упомянутых систем в силу их малых размеров влияют много факторов: конкурирующие анизотропии, магнитостатическое и обменное взаимо-

действия между зернами и т.п. Одновременный учет этих факторов усложняет аналитическое описание, и исследователи прибегают к компьютерному моделированию магнитной структуры и ее свойств.

В настоящей работе мы сравниваем два распространенных подхода к моделированию магнитной структуры нанопроволок: а) намагниченность и направление поля локальной анизотропии задаются одним полярным углом; б) намагниченность и анизотропия задаются двумя углами (полярным и азимутальным).

2. Метод поиска основного состояния намагниченности

Распределение намагниченности в компьютерном моделировании магнитных структур в одномерных системах нередко задается модулем намагниченности и полярным углом ϑ , указывающим направление. Простота описания в этом подходе очевидна. Плотность энергии обмена описывается выражением

$$W_{ex} = \frac{1}{2} A \left(\frac{d\vartheta}{dz} \right)^2, \quad (1)$$

где z – координата, отсчитываемая в направлении одномерной цепочки. Выражение для плотности энергии анизотропии в таком подходе имеет вид

$$W_A = -\frac{1}{2} K (\mathbf{e}_a \mathbf{m})^2 = -\frac{1}{2} K \cos^2(\vartheta - \alpha), \quad (2)$$

где \mathbf{e}_a – орт легкой оси намагничивания, \mathbf{m} – единичный вектор намагниченности, α – полярный угол между осью OZ и легкой осью намагниченности. Плотность энергии магнитостатического взаимодействия магнитных моментов кристаллитов с номерами n и k в дипольном приближении:

$$\begin{aligned} W_{dd} &= \frac{1}{2} \frac{\mu_0 V}{4\pi} \left[\frac{\mathbf{m}_k \mathbf{m}_n}{r_{kn}^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_k \mathbf{r}_{kn})(\mathbf{m}_n \mathbf{r}_{kn})}{r_{kn}^5} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\mu_0 M_S^2 V}{4\pi} \frac{\cos(\vartheta_k - \vartheta_n) - 3 \cos(\vartheta_k) \cos(\vartheta_n)}{|z_k - z_n|^3}, \end{aligned} \quad (3)$$

где μ_0 – магнитная постоянная, V – объем кристаллита, M_S – намагниченность насыщения ϑ_k – среднее по кристаллиту с номером k значение полярного угла, z – координата центра кристаллита. Как правило, на основе выражений (1)–(3) конструируется разностный вид уравнений равновесия, которые затем и используются в микромагнитном моделировании распределения намагниченности, процессов перемагничивания, фазовых переходов и пр.

Описанный подход справедлив лишь для узкого класса магнитных наносистем, в которых вследствие особой кристаллической структуры или наличия сильной наведенной магнитной анизотропии намагниченность не выходит из одной плоскости. Последнему условию, к примеру, удовлетворяют наноленты – нанопроволоки, сечения которых представляют собой вытянутые прямоугольники. Особый интерес вызывают ленты, ши-

рина и толщина которых составляет десятки-сотни нанометров, т.е. порядка размера однодоменности [1–3]. В случае когда толщина ленты значительно меньше ширины, размагничивающее поле не позволяет выйти намагниченности из плоскости ленты. Возможные распределения намагниченности в этом случае изображены на рис.1. На рис.1а показаны стрелками направления намагниченности кристаллитов в форме параллелепипеда с ферромагнитным обменом между ними. На рис.1б обмен между кристаллитами отсутствует и “антиферромагнитное” упорядочение обеспечивается дальнедействующим магнитостатическим взаимодействием. В этой ситуации одноугловая модель применима.

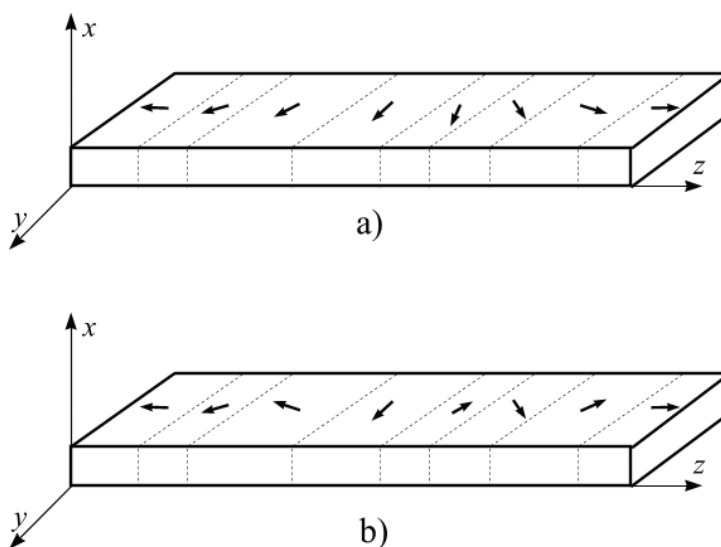


Рис.1. Возможные направления намагниченности в поликристаллической наноленте. а) – между кристаллитами имеется обменное взаимодействие, б) – обмен между кристаллитами ослаблен или отсутствует и намагниченность в кристаллитах взаимодействует только магнитостатически.

Если размеры проволоки в поперечных направлениях сравнимы, то описание распределения намагниченности только одним полярным углом ϑ , как это сделано в [4–6], для решения ряда задач не является полным. Распределение намагниченности, лежащее в одной плоскости, может быть реализовано лишь для структурно однородной цепочки: без флуктуаций поля анизотропии, обмена, объема зерен, неоднородных механических напряжений, шероховатостей поверхности и пр.

В прочих случаях при использовании одноуглового метода расчета существует опасность потери информации о некоторых устойчивых распределениях намагниченности, искажения значений коэрцитивной силы, поля старта и т.д. Чтобы избежать этих опасностей, необходимо и намагниченность, и направления локальных осей намагничивания задавать двумя углами.

Поликристаллические проволоки с линейным размером в сечении меньшего размера однодоменности материала можно считать одномерными магнитными системами, но с двумя степенями свободы у намагниченности. В этом случае вводятся: азимутальный угол намагниченности ϕ и азимутальный угол оси анизотропии – ψ . При этом выражения плотности энергий обмена, анизотропии и энергии магнитостатического взаимодействия отдельных кристаллитов принимают вид

$$W_{ex} = \frac{1}{2} A \left[\left(\frac{d\vartheta}{dz} \right)^2 + \sin^2 \vartheta \left(\frac{d\phi}{dz} \right)^2 \right], \quad (4)$$

$$W_A = -\frac{1}{2} K (\sin(\alpha) \sin(\vartheta) \cos(\phi - \psi) + \cos(\alpha) \cos(\vartheta))^2, \quad (5)$$

$$W_{dd} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 M_S^2 V}{4\pi} \frac{\sin(\vartheta_k) \sin(\vartheta_n) \cos(\phi_k - \phi_n) - 2 \cos(\vartheta_k) \cos(\vartheta_n)}{|z_k - z_n|^3}. \quad (6)$$

Выражения (1)–(3) и (4)–(6) лежат в основе микромагнитного компьютерного моделирования магнитной структуры. Для этого вычисляются вращающие моменты, действующие на намагниченность, как производные от полной энергии магнетика по углам ϑ и ϕ . Моменты приравнивались к нулю – так формировалась система равновесных уравнений. Поиск решения проводится методом градиентного спуска.

Сравним описанные выше подходы на примере поиска основного состояния намагниченности цепочки кристаллитов с линейными размерами $a \ll \sqrt{A/K}$, где A – константа обмена, K – константа кристаллографической анизотропии материала кристаллитов.

При моделировании структуры в одноугловом подходе распределение намагниченности выглядит так, как уже показано на рис.1, и использовалось в работах [2,4,6-8], а также в [5] (цепочка электрических диполей). В упомянутых работах такое приближение в целом оправдано, так как рассматривались модели или без случайных неоднородностей магнитных параметров, или неоднородности представляли собой разориентацию локальных осей анизотропии (ЛОА), лежащую в одной плоскости. В реальных нанопроволоках направления ЛОА распределены по сфере. В этом случае предпочтительнее использовать двухугловое описание [9-11].

Нами было предпринято моделирование магнитной структуры поликристаллической нанопроволоки, представляющей собой набор соосно расположенных цилиндров [12,13] с равномерным распределением направлений ЛОА по сфере. В зависимости от соотношения основных магнитных параметров нанопроволоки (A, K, M_S, a) наблюдается большое разнообразие распределений намагниченности, некоторые из которых показаны на рис.2. Из рисунка видно, что использование одноугловых расчетов для моделирования намагниченности в нанопроволоках с неоднородностями анизотропии не позволяют выявить ряд устойчивых распределений. В двухугловой модели наблюдается характерное “антиферромагнитное” упорядочение магнитных моментов соседних кристаллитов по азимутальному углу с одновременным плавным разворотом полярного угла. При этом обеспечивается более устойчивое состояние по сравнению с неизменным азимутальным углом. Подстройка намагниченности во всех случаях производится под направления эффективной анизотропии магнитных блоков (стохастических доменов) [11,14].

Рис.2с показывают “специализацию” ролей полярного и азимутального углов. Азимутальный угол обеспечивает “антиферромагнитное” упорядочение. В то же время изменение полярного угла происходит плавно при переходе от кристаллита к кристаллиту. В [13], использовавшей двухугловую модель, показано, что магнитостатическое взаи-

модействие выполняет роль упорядочивающего фактора, подобного обменной связи между кристаллитами. Одноугловая модель не дает возможности наблюдать этот эффект.

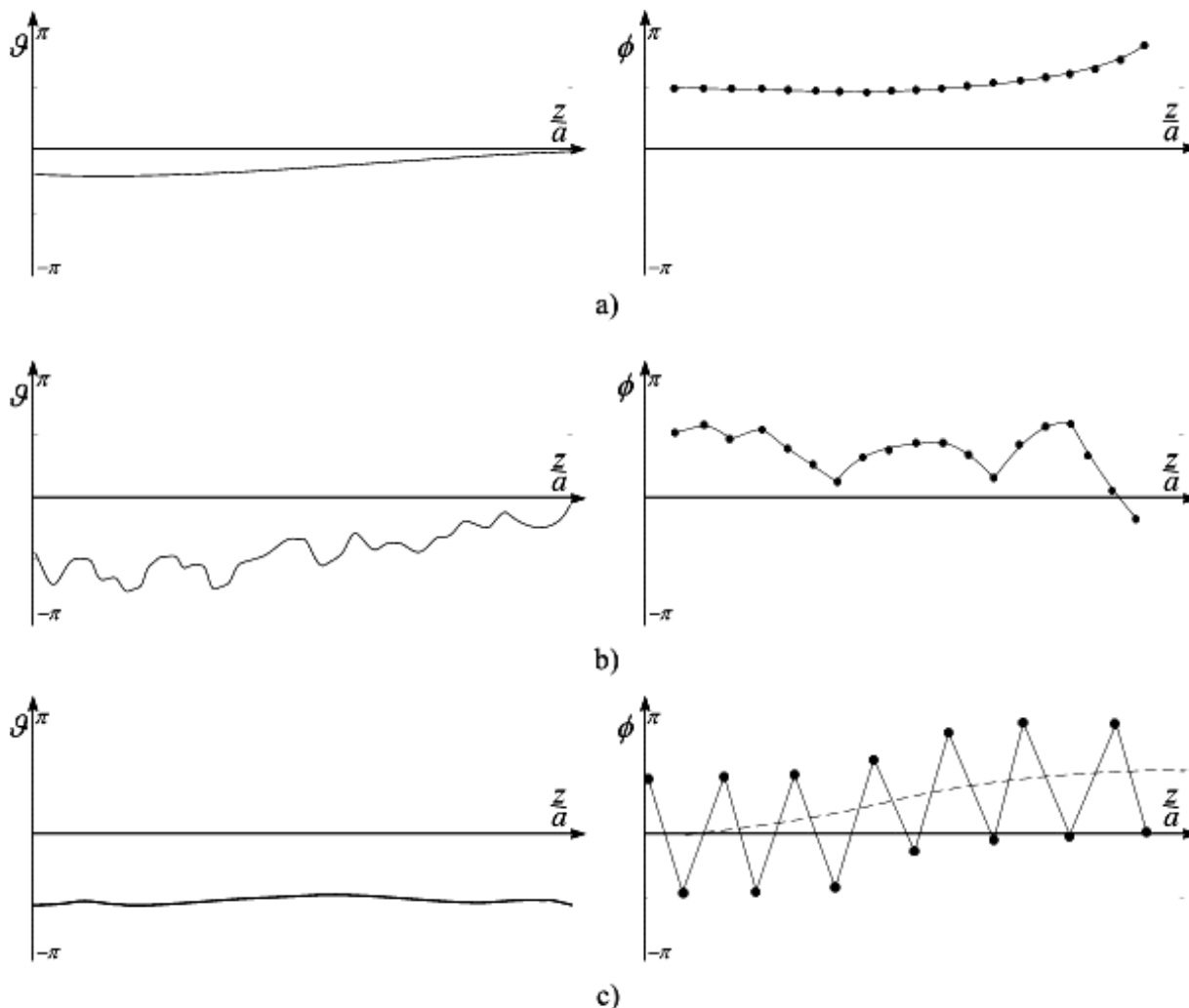


Рис.2. Распределения магнитных моментов, полученные в процессе моделирования магнитной структуры нанопроволок. Сплошная линия – координатная зависимость полярного угла намагниченности, точки – направления азимутального угла намагниченности. Рис.а получен для нанопроволоки с параметрами: $a\sqrt{K/A} = 0.1$, $\mu_0 M_S/K = 0.01$, $\Delta N = N_{\parallel} - N_{\perp} = 0.61$ – разность размагничивающих факторов кристаллитов вдоль оси z и перпендикулярно ей. Рис.б получен при параметрах: $a\sqrt{K/A} = 0.2$, $\mu_0 M_S/K = 0$, $\Delta N = N_{\parallel} - N_{\perp} = 0$. В модели на рис.с обменное взаимодействие между кристаллитами выключено [13], остальные параметры таковы: $a\sqrt{K/A} = 0.05$, $\mu_0 M_S/K = 25$, $\Delta N = N_{\parallel} - N_{\perp} = 0.51$.

В нанопроволоках с хаотическим полем локальной анизотропии реализуется стохастическая магнитная структура (блочная структура). Характерный размер магнитного блока (корреляционный радиус намагниченности) для всех трех моделей примерно одинаков и обеспечивается флуктуациями полярного угла. При отсутствии доменной структуры исследование зависимости полярного угла от координаты в случае его малых флуктуаций можно проводить в упрощенной одноугловой модели.

3. Перемагничивание путем смещения доменных стенок

Другое различие одноуглового и двухуглового расчетов проявляется в моделировании процесса смещения доменных стенок (ДС) и их аннигиляции при столкновении. Для численного эксперимента в этом случае к выражениям (4)–(6) добавляется энергия намагниченности во внешнем магнитном поле H :

$$W_H = -\mu_0 M_S^2 H \left(\sin(\vartheta_k) \sin(\alpha_n^{(H)}) \cos(\phi_k - \psi_n^{(H)}) + \cos(\vartheta_k) \cos(\alpha_n^{(H)}) \right). \quad (7)$$

Здесь $\alpha_n^{(H)}$ и $\psi_n^{(H)}$ – полярный и азимутальный углы направления внешнего поля.

При численном анализе движения ДС одноугловой подход слишком груб не только по причине наличия пространственного распределения направлений ЛОА, но и из-за особого проявления магнитостатического взаимодействия между зернами, приводящему к “антиферромагнитному” упорядочению по азимутальному углу.

В одноугловой модели азимутальный угол заморожен и при движении доменной стенки не изменяется. Результат освобождения азимутального угла должен заключаться в том, что намагниченность в доменной стенке в большей степени прогибается под потенциальный рельеф, создаваемый дефектами, и глубже в него погружается. Это должно приводить к увеличению силы закрепления ДС и увеличению поля старта и коэрцитивной силы.

Мы провели численный анализ движения ДС на трех моделях:

I) направления ЛОА равномерно распределены по сфере, а направление намагниченности характеризуется одним полярным углом (азимутальный угол заморожен),

II) направления ЛОА равномерно распределены по сфере, направление намагниченности характеризуется полярным и азимутальными углами (двухугловой расчет),

III) ЛОА, как и намагниченность, распределены на плоскости и описываются только полярными углами (полностью одномерная модель).

Известно, что коэрцитивная сила H_C в случайно-неоднородных нанопроволоках определяется дисперсией силы закрепления $\sigma^2 = \langle (F/A)^2 \rangle$, а также средней длиной волны ζ функции $F(z)$ [16]:

$$H_C = \frac{\sigma}{2M_S} \sqrt{\ln\left(\frac{L}{\zeta}\right)}. \quad (8)$$

Здесь L – длина нанопроволоки.

Для сравнения H_C в процессе численного эксперимента были вычислены дисперсии σ^2 трех моделей. В результате были получены следующие значения: $\sigma_I^2 = 12.15$, $\sigma_{II}^2 = 33.06$, $\sigma_{III}^2 = 27.82$. Характерные значения ζ для всех трех моделей примерно одинаковы, поэтому различия значений коэрцитивной силы определяются в основном дисперсиями закрепляющей силы. Максимальное значение H_C реализуется в модели с двумя степенями свободы намагниченности.

Другой важной характеристикой процесса намагничивания является поле старта доменной стенки – поля первого срыва стенки H_S . Нами было проведено исследование процесса начала движения доменной стенки под действием растущего внешнего поля. Статистические распределения поля старта представлены на рис.3. Как видно из рисунка, наиболее вероятное значение поля старта, как и коэрцитивная сила, максимально при расчетах в модели II.

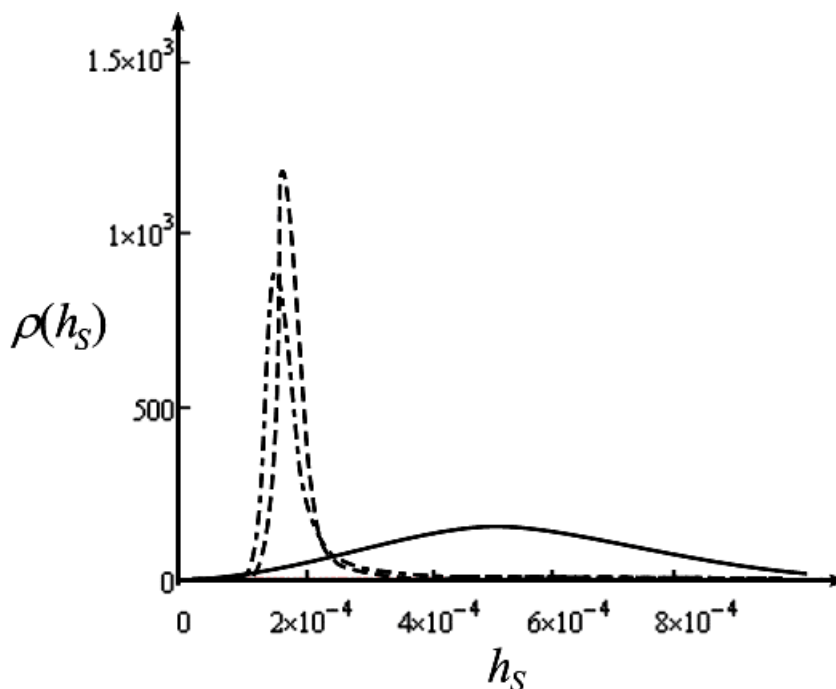


Рис.3. Распределения поля старта доменной стенки трех рассматриваемых моделей. Здесь введено безразмерное определение: $h_S = 2M_S H_S S / A$, S – площадь сечения проволоки. Моделирование проводилось при значениях характерных параметров: $a\sqrt{K/A} = 0.1$, $\mu_0 M_S^2 / K = 81$. Сплошная линия – модель II, штриховая линия – модель I и штрих-пунктирная линия – модель III.

Качественное отличие результатов при использовании одноугловой и двухугловой моделей имеет место и при описании столкновения доменных стенок. Как показало моделирование, возможны два принципиально отличающиеся друг от друга сценария столкновения в зависимости от ориентации намагниченности в доменных стенках. В первом намагниченность в центрах сталкивающихся стенок ориентирована одинаково и при их столкновении происходит схлопывание (рис.4а). Этот процесс аннигиляции происходит одинаково в одноугловой и двухугловой моделях. Во втором сценарии из двух 180-градусных доменных стенок с противоположным направлением намагниченности рождается одна 360-градусная (рис.4б). После столкновения увеличение внешнего магнитного поля приводит к сжатию доменной стенки в обеих моделях. В двухугловой модели 360-градусная доменная стенка при большом внешнем поле исчезает благодаря развороту намагниченности (рис.5) через азимутальный угол.

Важно, что при численном моделировании процессов столкновения противоположно намагниченных стенок в одноугловом подходе не реализуется возможность намагниченности развернуться путем изменения азимутального угла. Это сужает область

применения одноуглового подхода даже в моделях нанолент в случаях, когда исследуется перемагничивание в достаточно больших полях.

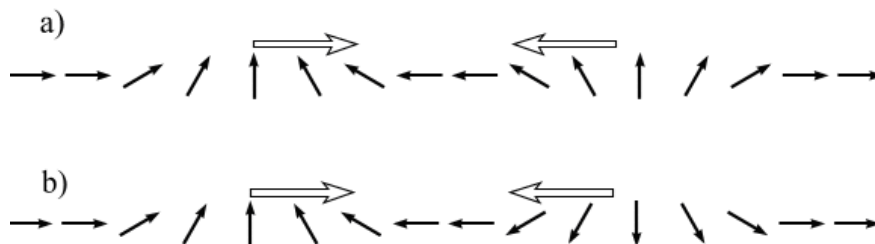


Рис.4. Две характерные возможности распределения намагниченности в сталкивающихся доменных стенках.

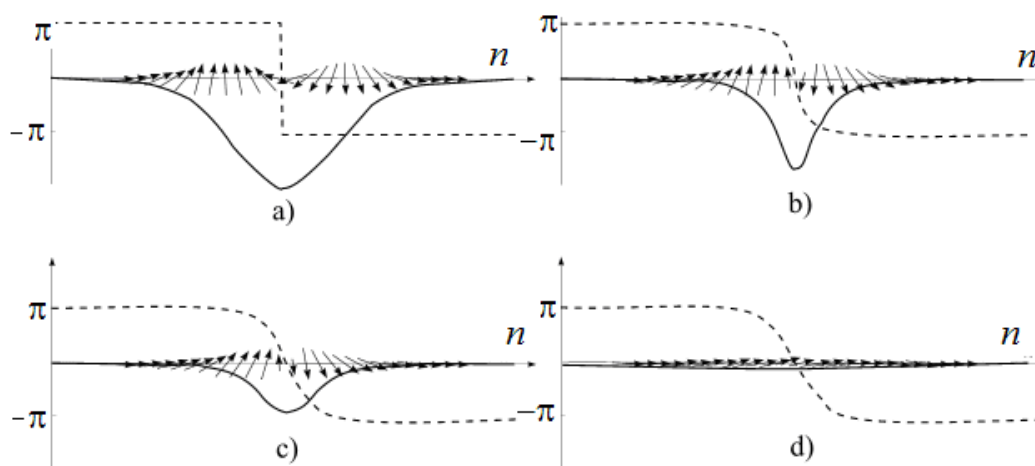


Рис.5. Эволюция намагниченности (схлопывание стенок) в случае наличия возможности разворота из-за азимутального угла. Сплошной линией задана координатная зависимость полярного угла, штриховой – азимутального.

4. Заключение

Сравнение трех моделей численного моделирования магнитных свойств нанопроволок показало их возможную неэквивалентность, которая проявляется при исследовании процессов смещения доменных границ и формировании равновесного распределения намагниченности.

Искусственное закрепление одной степени свободы намагниченности при компьютерном моделировании распределения намагниченности может привести к неполному определению возможных распределений намагниченности. К примеру, в случае ослабленного обменного взаимодействия между кристаллитами возможна реализация стохастической магнитной структуры с антиферромагнитными азимутальными разворотами моментов.

Сравнение силового рельефа, закрепляющего стенки в рассматриваемых моделях, также выявило существенные отличия. Расчеты в двухугловом методе дают большие значения коэрцитивной силы и поля старта доменной стенки. Кроме того, фиксация одной степени свободы намагниченности не позволяет обнаружить и исследовать процесс аннигиляции стенок с антипараллельным (или близким к этому) направлением намагниченности.

Вместе с тем следует отметить, что существуют ситуации и объекты, моделирование магнитных свойств которых оправдано в одноугловом приближении. Как правило, это тонкие наноленты, нанопроволоки с сильным обменным взаимодействием между кристаллитами и квазиоднородное распределение намагниченности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е., Эллиотт Р.Дж., Эпштейн Э.М. Магнитостатическая энергия и полосовая доменная структура в ферромагнитной пластине конечной ширины с параллельной анизотропией // ФТТ, 2002, т.44, № 6, с.1064–1069.
2. Martinez E., Lopez-Diaz L., Torres L., Tristan C., Alejos O. Thermal effects in domain wall motion: Micromagnetic simulations and analytical model // Phys. Rev. B, 2007, v.75, p.174409
3. Brands M., Wieser R., Hassel C., Hinzke D., Dumpich G. Reversal processes and domain wall pinning in polycrystalline Co-nanowires // Phys. Rev. B, 2006, v.74, p.174411.
4. Porrati F., Wulfhekel W., Kirschner J. An analytical model for ultrathin films with spatially varying magnetic anisotropies // JMMM 2004, v.270, p.22–31.
5. Speight J.M., Zolotarev Y. Kinks in dipole chains // Nonlinearity, 2006, v.19, p.1365–1382.
6. Комогоорцев С.В., Исхаков Р.С. Кривая намагничивания и магнитные корреляции в нанопроволке ферромагнитных зерен со случайной анизотропией // ФТТ, 2005, т.47, № 3, с.480–486.
7. Dugaev V.K., Vieira V.R., Sacramento P.D., Barnas J., Araujo M.A.N., Berakdar J. Current-induced motion of a domain wall in a magnetic nanowire // Phys. Rev. B, 2006, v.74, p.054403.
8. Bergmann G., Lu J.G., Tao Y., Richard S. Thompson, Frustrated magnetization in Co nanowires: Competition between crystal anisotropy and demagnetization energy // Phys. Rev. B, 2008, v.77, p.054415.
9. Каретникова И.Р., Нефедов И.М., Сапожников М.В., Фраерман А.А., Шерешевский И.А. Неоднородные состояния и механизм перемагничивания цепочки классических диполей // ФТТ, 2001, т.43, № 11, с.2030–2034.
10. Eisenbach M., Dijkstra M., Gyorffy B.L. On the states of orientations along a magnetically inhomogeneous nanowire // JMMM, 2000, v.208, p.137–143.
11. Иванов А.А., Орлов В.А., Патрушев Г.О., Подольский Н.Н. Основное состояние намагниченности нанопроволок // ФММ, 2010, т.109, № 2, с.130–139.
12. Ivanov A.A., Orlov V.A., Podolsky N.N. Magnetic Structure of Nanowires and Magnetostatic Interaction // Solid State Phenomena, 2011, v.168–169, p.269–272.
13. Иванов А.А., Орлов В.А. Дуализм магнитостатики в одномерной цепочке классических магнитных моментов // ФТТ, 2011, т.53, № 7, с.1266–1271.
14. Иванов А.А., Патрушев Г.О. Структура намагниченности стохастических магнетиков // ФММ, 1998, т.86, № 4, с.331–336.
15. Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
16. Ivanov A.A., Orlov V.A., Erementchouk M.V., Podolsky N.N. Statistics of irreversible displacements of domain walls in nanowires // Eur. Phys. J. B, 2011, v.83, p.83–91.
17. Иванов А.А., Орлов В.А. Сравнительный анализ механизмов закрепления доменной стенки в нанопроволке // ФТТ, 2011, т.53, № 12, с.2318–2326.

Поступила в редакцию 28.06.2012.