

УДК 537.611.2; 537.623; 004.942

**В. Андрійчук¹, докт. техн. наук; Ю. Бачинський²,
канд. техн. наук; М. Наконечний¹**

¹Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

²Тернопільський національний педагогічний університет
імені Володимира Гнатюка

МІКРОМАГНІТНИЙ РОЗПОДІЛ ПОВЕРХНІ ПЛІВКИ НА ОСНОВІ КОМП'ЮТЕРНОЇ МОДЕЛІ

Резюме. Запропоновано методику, та розроблено комп'ютерну модель, для дослідження поведінки магнітних наноматеріалів під впливом зовнішніх магнітних полів. Побудовано графіки розподілу вектора намагніченості. Проведено аналіз отриманих результатів згідно мікромагнетичної теорії. Отримано залежності основних магнітних характеристик ферромагнетика. Отримано теоретичний розрахунок петлі магнітного гістерезису для ультратонких плівок, без врахування впливу струмів Фуко.

Ключові слова: мікромагнітний розподіл, коерцитивна сила, петля магнітного гістерезису.

V. Andreychuk Y. Bachinsky M. Nakonechniy

MICROMAGNETIC DISTRIBUTION OF FILM SURFACE BASING ON THE COMPUTER MODEL

Summary. Computer design of distributing the magnetized ferromagnetic gives the possibility to predict the behavior of material in variable magnetic fields. The software in the environment of MatLab was developed in this paper for the design of micromagnetic distribution on the surface of one layer film. The mathematical model was realized on the basis of discretely dipole approximation taking advantage of the Monte-Carlo method.

The crystalline barn of F^{3+} atom was chosen as discretely environment. The total inside energy of dipole consists of exchangeable interrelation energy, dipole energy – dipole interrelation, energy of surface magnetical anisotropy and the external energy of magnetic field. In the realized model the surface of the film was distributed into n -identical parts, in which the modules of magnetical moments are considered to be similar, and the total film magnetization depends on mutual location of each of moments. Calculation was carried out in polar system of coordinate, as in one-layer films the magnetic moment and vector of magnetic anisotropy can be change a in one plane.

According to the results of calculation vector fields of magnetization distribution were built for different values of tension and dependence of the sample magnetization on outside magnetic field. It was shown in the paper that sharp magnetization at small enough values of outside field takes place due to the reorientation of magnetical moments domens, the direction of which is close to the direction of the outside field. Further increase of magnetization takes place due to the increase of the domens area. Basing on the behavior of the sample the estimation of magnetization saturation value and the power of coercive force was carried out.

To build the loops of magnetic hysteresis the model on the basis of arctangents that gives the results close to the experimental ones was used. The built loop does not represent the total expenditures while overmagnetizing, as the expenditures for vortex currents were not taken into account.

Key words. Micromagnetic distribution, coercive force, magnetic hysteresis loop.

Постановка проблеми. Стрімкий розвиток та впровадження нанотехнологій вимагає знання поведінки матеріалів згідно з сучасним станом мікромагнітної теорії. Комп'ютерне моделювання дає можливість розрахувати властивості та спрогнозувати поведінку об'єкта на стадії моделі. Математичне моделювання широко використовується в багатьох сферах науки, особливо доцільно його використовувати тоді, коли неможливо отримати практичне вирішення завдання.

До основних магнітних характеристик ферромагнітних матеріалів та тонкоплівкових, зокрема, можна віднести ширину доменної границі, величину обмінної

взаємодії та анізотропії. Знання цих параметрів дає можливість на основі комп'ютерної моделі розрахувати такі характеристики, як намагніченість насичення, коерцитивну силу, магнітну проникність та побудувати петлю магнітного гістерезису.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. На основі теорії мікромагнетизму, що була розроблена Ландау та Ліфшицем, запропоновано кілька розв'язків задач для моделей, що відображають мікро-дискретність середовища. Зокрема, широке поширення при чисельному моделюванні магнітних середовищ отримала модель на основі так званої дискретно-дипольної апроксимації [1, 2]. Відповідно до цієї моделі дискретне середовище розглядається як сукупність магнітних диполів (моментів), під якими залежно від рівня деталізації й розв'язуваної задачі можуть розумітися як окремі спіни, так і магнітні моменти часток, на які розбивається середовище. В останньому випадку в якості часток можна розглядати самі наночастинки, мікрокристаліти та іншим чином сформовані області, в межах яких магнітний момент вважається однорідним.

У рамках дискретно-дипольної апроксимації задача полягає в визначенні рівноважного стану або рівноважної конфігурації розподілу магнітних моментів. До числа таких задач відносяться задачі дослідження статичних магнітних характеристик середовищ, наприклад, вивчення доменної структури або розрахунок петель гістерезису. Відомо кілька різних підходів, що дозволяють визначити рівноважну конфігурацію магнітних моментів, кожен з яких, як правило, орієнтований на вирішення певного класу задач. Наприклад, заснований на інтегруванні методом Рунге-Кутта системи диференціальних рівнянь Ландау-Ліфшиця-Гільберта для кожної наступної конфігурації магнітних моментів, починаючи з випадково заданої. Наступний підхід, що дозволяє отримати конфігурації магнітних моментів, досить близьких до основного рівноважного стану системи, базується на методі Монте-Карло [3, 4]. Однак цей метод потребує великої кількості обчислень вже при відносно невеликій кількості диполів у моделі.

Мета і завдання дослідження. Розробити математичну модель розподілу намагніченості на поверхні тонкої магнітної плівки, що давала б можливість оцінити магнітні властивості наноматеріалу.

Виклад основного матеріалу та методика досліджень. Добрі результати з визначення рівноважної конфігурації магнітних моментів дає підхід, заснований на релаксації системи у відповідності з поведінкою її внутрішніх ефективних магнітних полів, що діють на кожен диполь. Для цього у випадковому порядку розраховують локальне поле на певному магнітному диполі й у відповідності з діючими силами встановлюють його нове положення. Обчислення проводять до тих пір, поки не стабілізуються положення всіх магнітних моментів.

У даній моделі феромагнітна плівка розглядається як дискретне середовище, що складається з магнітних диполів, рівномірно розподілених по її об'єму. Вільна енергія такої системи буде виражатися сумою енергій зерен постійний і дорівнює намагніченості насичення.

$$E = E_{об} + E_{оун} + E_{аніз} + E_з. \quad (1)$$

Вважається, що феромагнітна плівка перебуває при температурі, вищій температури Кюрі, і що границі зерен не впливають на магнітну взаємодію, а модуль намагніченості. Тоді енергія обмінної взаємодії для і-го диполя буде дорівнювати

$$E_{об} = \frac{1}{2} A \sum (\vec{M}_i \cdot \vec{M}_j), \quad (2)$$

де A – величина обмінного параметра; M_i, M_j – намагніченість і-го, j -го диполів. Сумування проводиться лише по сусідніх диполях у зв'язку з тим, що величина параметра A різко спадає з відстанню. В міру анізотропії обмінної взаємодії, вона формує лише величину намагніченості (у випадку феромагнетика) і не впливає на їх напрям [5]. Це зумовлено тим, що обмінна взаємодія є усередненою кулонівською взаємодією, яка не залежить від напрямку атомних спінів. Так як зі спіновими моментами імпульсу пов'язані спінові магнітні моменти, то упорядкування атомних спінів відповідає упорядкуванню спінових магнітних моментів атомів

$$\vec{m}_s = -2\mu_0 \vec{s}, \quad (3)$$

де s – кількість не скомпенсованих спінів. Тоді для кристалічної решітки, що складається з N атомів,

$$M = |m_s| N. \quad (4)$$

На відміну від обмінної взаємодії, диполь-дипольна взаємодія є набагато слабшою, проте вона слабо спадає з відстанню. Тому враховувати потрібно весь об'єм зразка.

$$E_{оун} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \left(\frac{(\vec{M}_i \cdot \vec{M}_j)}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{M}_i \cdot \vec{r}_{ij}) \cdot (\vec{M}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right). \quad (5)$$

Обмінна енергія і диполь-дипольна взаємодія формують довжину вектора \vec{M} , а його напрям визначається енергією анізотропії. Як бачимо з формули, енергія диполь-дипольної взаємодії залежить не лише від взаємної орієнтації спінів, але й від їх орієнтації відносно вектора r . Спіни в кристалі формують правильну решітку. При цьому в якомусь напрямі вони розподілені щільніше, а в якомусь – рідше, що призводить до виділення напрямку вектора M [6].

$$E_{аніз.} = -V(K_1 \sin^2 \Theta + K_2 \sin^4 \Theta), \quad (6)$$

де K_1, K_2 – константи анізотропії, які залежать від виду матеріалу; Θ – кут між M і віссю легкого намагнічування. Внаслідок інваріантності часу в рівняння включають лише компоненти вектора M у парній степені [7].

Вклад зовнішнього магнітного поля в загальну енергію феромагнетика виражається енергією Зеемана

$$E_з = -(\vec{M} \cdot \vec{H}), \quad (7)$$

де H – зовнішнє магнітне поле.

Рівноважна конфігурація розподілу магнітних моментів відповідає мінімуму вільної енергії системи

$$\sum \frac{dE}{dM} = 0. \quad (8)$$

Згідно з [5] в ультратонких плівках вісь легкого намагнічування (ВЛН) лежить у площині плівки, а магнітний момент «обертається» в площині XY . У полярній системі координат $M_x = M \cos(\alpha)$, $M_y = M \sin(\alpha)$. Як бачимо з рівняння (8) та рис.1, повна енергія диполя залежить від взаємного розташування його сусідів, тобто від кута α (α – кут між i -тим і j -тим диполями).

Обмінна енергія мінімальна при орієнтації магнітних моментів в одному напрямку, енергія диполь-дипольної взаємодії мінімальна при орієнтації магнітних моментів протилежно один одному. Енергія анізотропії мінімальна при орієнтації магнітних моментів уздовж ВЛН. Енергія Зеемана мінімальна при орієнтації магнітних моментів уздовж зовнішнього магнітного поля. Змінюючи орієнтацію випадковим чином вибраного диполя, досягається такої конфігурації, при якій енергія системи буде близька нулю.

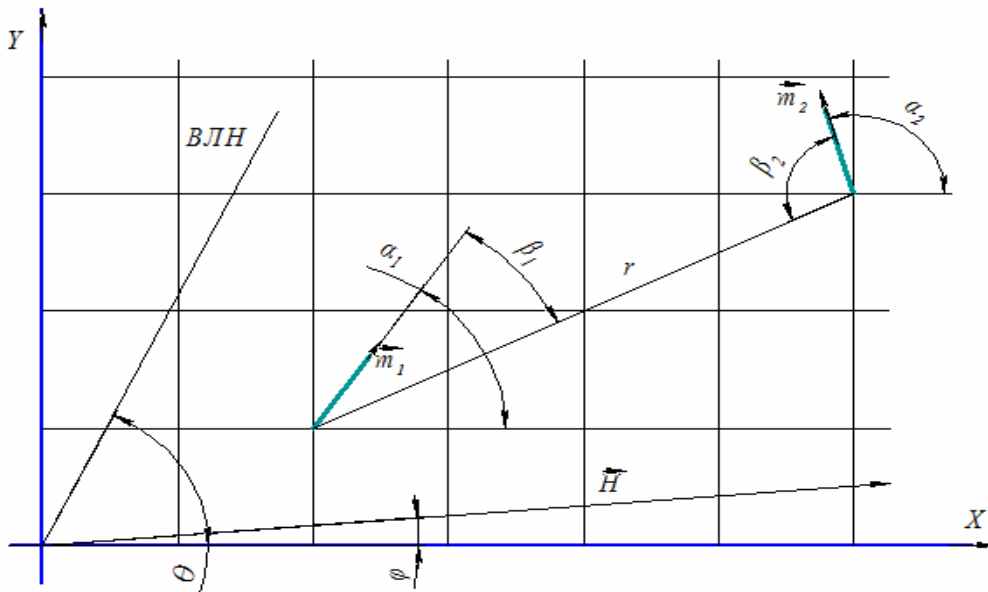


Рисунок 1. Геометричне представлення моделі

Figure 1. Geometric presentation of the model

На основі моделі було розроблено комп'ютерну програму в середовищі MatLab. У ній випадковим чином вибраному диполі змінювали його кут α в площині XY , тим самим змінюючи його намагніченість. Згідно з рівнянням (8) розраховували такий кут α , при якому абсолютне значення внутрішньої енергії системи було мінімальним. Дану операцію проводили до тих пір, поки внутрішня енергія системи не була близька або дорівнювала нулю ($E_{сист} = 0$).

Результати моделювання. Як бачимо з рівняння (8), енергія системи залежить від кута α , що може змінюватися від 0° до 360° . Моделювання проводилося для плівок заліза (Fe^{+++}). Значення обмінного інтеграла дорівнює $J=1 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}^3$, erg/cm^3 , константи анізотропії $K_1=4,3 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$, $K_2=2,05 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$, $M_s=1716 \text{ emu/cm}^3$.

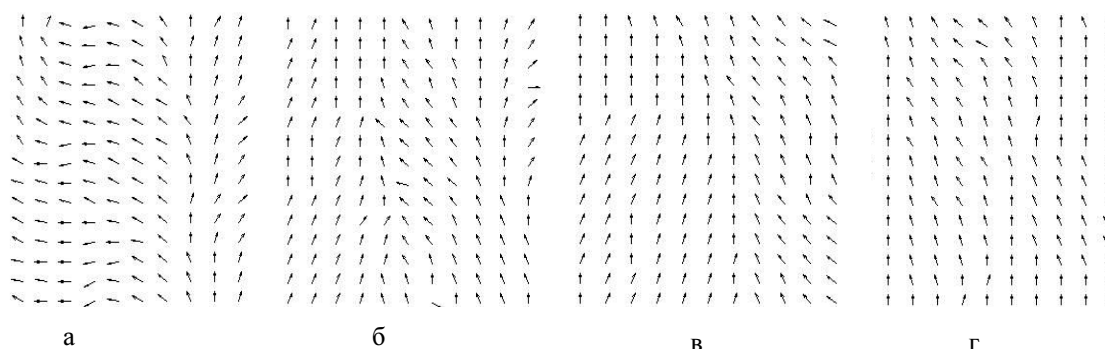


Рисунок 2. Рівноважна конфігурація магнітних моментів. Зовнішнє магнітне поле напрямлене перпендикулярно осі легкого намагнічування: а) $H=8$, б) $H=90$, в) $H=130$, г) $H=220$ (величина H дана у відносних величинах $M_s H/K$)

Figure 2. Equilibrium configurations of the magnetic moments. External magnetic field is directed perpendicular to the axis of easy magnetization

Як бачимо з рис.2, при малих значеннях зовнішнього поля конфігурація диполів для зменшення внутрішньої енергії орієнтується вздовж ОЛН. Проаналізувавши рис.2.3, можна побачити, що стрімке зростання намагніченості системи при малих H спричинене переорієнтацією магнітних моментів диполів, напрям яких був близький із напрямом зовнішнього магнітного поля. Подальше зростання намагніченості відбувається набагато повільніше, оскільки зменшення внутрішньої енергії системи відбувається за рахунок переорієнтації магнітних диполів системи. Подальше збільшення H буде супроводжуватися зростанням намагніченості. При деякому H_M система перейде у стан магнітного насичення $M/M_s=1$. Величина H_M залежить як від характеристик зразка, так і від орієнтації вектора H відносно ОЛН (рис.3).

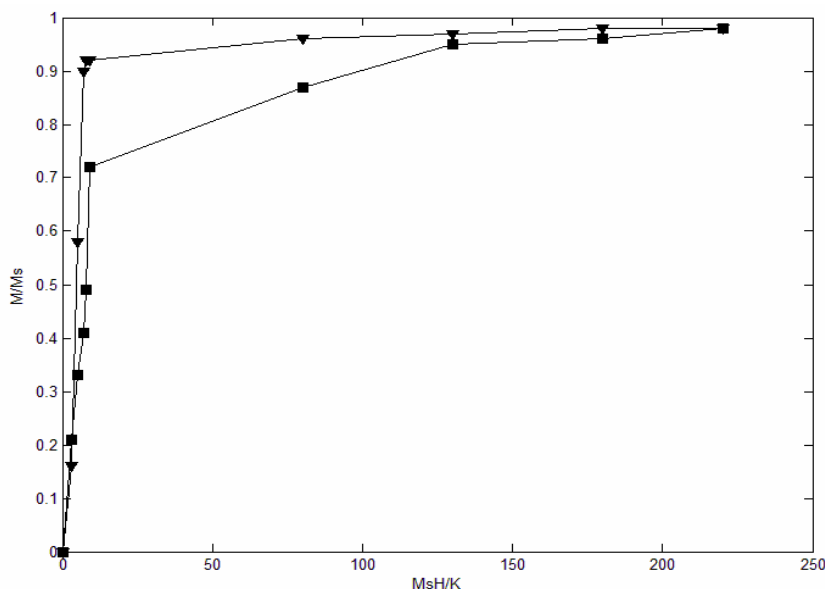


Рисунок 3. Залежність намагніченості зразка від зовнішнього магнітного поля:
 ▼ – вектор H , напрямлений уздовж ОЛН; ■ – вектор H , перпендикулярний ОЛН

Figure 3. Dependence of the magnetization sample on the external magnetic field:
 ▼ – vector H directed along the easy axis; ■ – vector H is perpendicular to the easy axis

Математична модель петлі гістерезису.

На сьогодні існує велика кількість математичних моделей для опису петель магнітного гістерезису. Існуючі моделі базуються на кусочко-лінійних, гіперболічних, логарифмічних та експоненціальних апроксимаціях, усі вони показують добрі результати в слабких полях [8]. При полях близьких або більших коерцитивної сили, потрібно вибирати модель залежно від магнітних властивостей конкретного матеріалу. Математична модель на основі арктангенсів у цілому показує добрі результати в процесі перемагнічування феромагнетиків.

$$M = \frac{2}{\pi} M_s \arctg \left[\frac{H \pm H_c}{H_c} \operatorname{tg} \left(\frac{\pi M_{rs}}{2 M_s} \right) \right], \quad (9)$$

де M_s , H_c , M_{rs} – намагніченість насичення, коерцитивна сила та залишкова намагніченість відповідно. Недоліком такої апроксимації є незамкненість петлі магнітного гістерезису при $H \rightarrow \infty$ та можливість її застосування лише при описування граничних петель.

Як бачимо з рис.3, при перемагнічуванні в напрямку ОЛН збільшення намагніченості відбувається за рахунок зростання доменів напрямком яких збігається з напрямком зовнішнього поля, оскільки поле прикладене паралельно ОЛН, процес намагнічування закінчується в досить слабких зовнішніх полях. Під час перемагнічування перпендикулярно ОЛН, при $H=0$, домени будуть орієнтовані як у напрямку H , так і паралельно ОЛН, кут між якими 45° (рис.2а).

$$M_{rs} = M_s \cos \alpha = 0.71 M_s. \quad (10)$$

Оцінювальну величину коерцитивної сили для 180° доменних границь визначаємо як

$$H_c = p \frac{K_1}{M_s}, \quad (11)$$

де p – коефіцієнт, що залежить від симетрії решітки кристала та механізму перемагнічування. Для решітки заліза він лежить у межах 0,03–0,05.

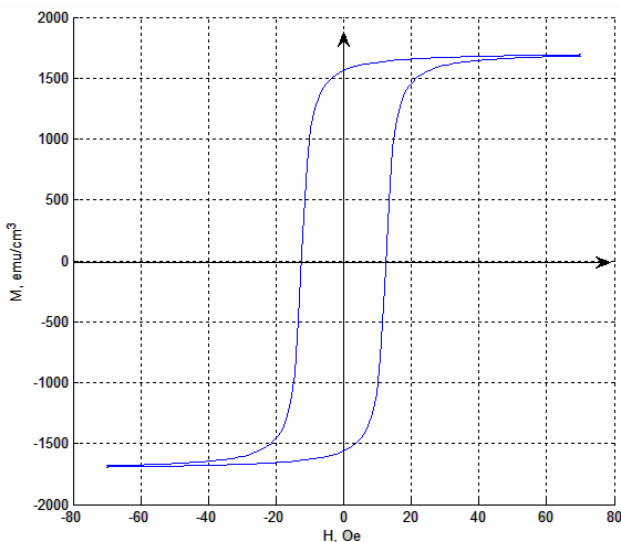


Рисунок 4. Петля магнітного гістерезису згідно з рівнянням 9. $M_s=1714 \text{ emu/cm}^3$, $H_c=12 \text{ Oe}$, $M_{rs}=0,71 \times M_s$

Figure 4. Magnetic hysteresis loop according to equation 9

Розрахувавши значення залишкової намагніченості та коерцитивної сили згідно з рівняннями (10) (11) та підставивши отримані результати в рівняння (9), отримаємо петлю магнітного гістерезису, зображену на рис.4. Отримана петля магнітного гістерезису практично збігається з результатами, отриманими експериментально для чистого заліза. Як бачимо з рівнянь (9–11), отримана модель не дає повних магнітних характеристик матеріалу, оскільки не було враховано втрати на вихрові струми.

Висновки. Розроблено комп'ютерну програму в середовищі MatLab, що дає можливість проводити мікромагнітний розрахунок ультратонких ферромагнітних плівок, та за отриманими результатами будувати петлю магнітного гістерезису. На основі отриманих результатів можна зробити висновок, що основними мікромагнітними величинами, що характеризують поведінку ферромагнетика, є величина обмінної взаємодії та значення константи магнітної анізотропії. Саме від цих величин залежать геометричні розміри доменних границь та характер процесу перемагнічення у зовнішньому магнітному полі як ферромагнітних, так і антиферромагнітних зразків.

Conclusions. Computer software in an environment MatLab, which makes possible to calculate micro magnetic ultrathin ferromagnetic films, and according to the results to build a magnetic hysteresis loop has been developed in the paper. Basing on the obtained results it can be concluded that the main micro magnetic variables that characterize the behavior of ferromagnetic exchange interaction is the value of the constant magnetic anisotropy. These are the values on which the geometrical sizes of domain boundaries and the characteristic of the remagnetization process in an external magnetic field both ferromagnetic and antiferromagnetic samples depend.

Список використаної літератури

1. Monte Carlo Simulation for Magnetic Domain Structure and Hysteresis Properties / K. Yamaguchi, K. Suzuki, O. Nittono // Fukushima University Japan. – 2011. – p. 539 – 562.
2. Magnetic structure and hysteresis in hard magnetic nanocrystalline film / Yongmei M. Jin, Yu U. Wang, Andrei Kazaryan, Yunzhi Wang // Computer simulation, journal of applied physics . – 2011. – № 10. – p. 48 – 52.
3. Magnetic domain walls in thick iron films/ Aharoni A. // Physical review. – 1991. – №1. – p. 1290 – 1293.
4. Микромагнитный расчет равновесного распределения магнитных моментов тонких пленок [Текст] / Б.А. Беляев, А.В. Изотов, Ан. А. Лексиков. // ФТТ. – 2010. – Т 52, № 8. – с. 1949 – 1556.
5. Тикадзуми, С. Физика ферромагнетизма. Магнитные характеристики и практические применения: пер. з японської [Текст] / С. Тикадзуми, А.И. Леонова; под. общ. ред. Р. В. Писарева. – М.: Мир, 1987. – 419 с.
6. Хуберт, А. Теория доменных стенок в упорядоченных средах [Текст] / А.Хуберт. – М.: Мир, 1977. – 313 с.
7. Бучельников, В.Д. Физика магнитных доменов [Текст] / В.Д. Бучельников // Соросовский образовательный журнал. – 1997. – № 12. – С. 92. – 99.
8. Матюк, В.Ф. Математические модели кривой намагничивания и петель магнитного гистерезиса [Текст] / В.Ф. Матюк, А.А. Осипов // Неразрушающий контроль и диагностика. – 2011. – № 2. – С. 3 – 24.

Отримано 03.12.2013