

## МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ДОМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ В НАНОПЛАСТИНКЕ

Представлены результаты численного моделирования доменных структур в нанопластинке с поверхностной анизотропией. Показано, что в одном и том же образце возможны равновесные состояния, на которые «включение» поверхностной анизотропии влияет по-разному: а) не оказывает заметного влияния, б) влияет только на структуру доменных границ, в) качественно изменяет вид доменной структуры.

**Ключевые слова:** Микромагнитное моделирование, доменная структура, поверхностная анизотропия, нанопластинка

Изменение магнитных параметров даже в очень тонком поверхностном слое частицы существенно влияет на ее магнитные свойства [1-4]. Образование такого слоя может быть связано как с поверхностными нарушениями структуры при получении частиц, так и со снижением локальной кристаллографической симметрии атомов поверхностных и приповерхностных слоев. Это приводит к формированию поверхностной магнитной анизотропии (ПМА) типа «перпендикулярная легкая ось» или «легкая плоскость» (константа ПМА  $K_s < 0$  и  $K_s > 0$ , соответственно).

Образование аналогичной анизотропии следует ожидать и на поверхности кристаллитов в поликристаллических сплавах вдоль межкристаллитных прослоек. И ее влияние будет возрастать с увеличением степени дисперсности микроструктуры.

К сожалению, экспериментальное измерение  $K_s$  возможно только в исключительных случаях. Как правило, это удается сделать косвенно в случае тонких пленок. Поэтому основное внимание исследователей было направлено на изучение влияния ПМА на магнитные поведение тонких пленок. Влияние же ПМА на микромагнитные свойства частиц (кристаллитов в поликристаллах) практически не исследова-

лось. В частности, пока не рассматривались возможности формирования метастабильных состояний магнетиков обусловленных ПМА. А между тем метастабильное двухдоменное состояние в отсутствие внешнего магнитного поля было зафиксировано в изолированных частицах  $\text{YFeO}_3$ , размер которых меньше критического размера однодоменности [5]. Также было обнаружено метастабильное магнитное состояние микрокристаллических сплавов  $\text{GdCo}_5$  в слабых магнитных полях после их термического размагничивания [6].

В ряде работ методами микромагнитного моделирования исследуется влияние поверхностной анизотропии на структуру и подвижность доменных границ, но при расчете доменных структур влиянием поверхностной анизотропии обычно пренебрегают. Отсутствие или учет поверхностной анизотропии могут из одного и того же начального состояния приводить к различным доменным структурам. Однако такой эффект еще не означает существенного влияния поверхностной анизотропии, поскольку его можно получить используя различные методы моделирования. Интерес представляют случаи, когда рассчитанная без учета поверхностной анизотропии доменная структура после «включения» поверхностной анизотропии теряет устойчивость и переходит в другое состояние.

### Постановка и метод решения задачи

В настоящей работе рассматривается влияние поверхностной анизотропии на вид доменных структур в пластинке одноосного магнетика с осью легкого намагничивания, ортогональной плоскости пластинки. Расположение координатной системы показано на рис. 1.

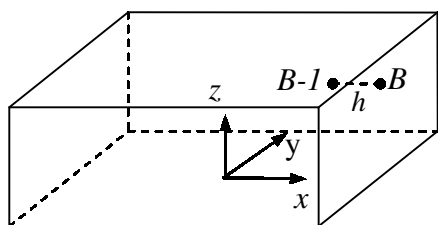


Рисунок 1. Расположение координатной системы

Поле намагниченности предполагается трехмерным  $M = M(x, y, z)$  и рассчитывается путем нахождения стационарных решений уравнения Ландау-Лифшица [7], которое можно записать в безразмерном виде:

$$\frac{\partial m}{\partial \tau} = H \times m - \alpha m \times (m \times H), \quad (1)$$

где  $m = M/M_s = (m^x, m^y, m^z)$  – единичный вектор;

$M_s = |M|$ ;  $\tau = t|\gamma|M_s$ ;  $t$  – время;  $\gamma$  – гиромагнитное отношение;

$$H = -\nabla U + \frac{2A}{M_s^2 L^2} \Delta m +$$

$+ w(m \cdot w)(2K_1 + 4K_2(1 - (m \cdot w)^2))/M_s^2$  – вектор эффективного поля;  $A$  – константа обмена;  $L$  – характерный линейный размер (одна из сторон пластинки);  $K_1, K_2$  – константы объемной анизотропии;  $w$  – единичный вектор направления оси легкого намагничивания;  $U$  – потенциал магнито-статического поля, для вычисления которого использовался метод работы [8], примененный к конечной расчетной области;  $\alpha$  – параметр, определяющий вклад диссипативного члена. Приводимые ниже результаты расчетов получены при  $\alpha = 0,2$ . Предполагалось, что на гранях пластинки выполняется условие [7]:

$$m \times \left[ \frac{\partial m}{\partial(-n)} - \bar{K}_s (m \cdot n)n \right] = 0, \quad (2)$$

где  $n$  – внешняя нормаль к поверхности пластинки;

$$\frac{\partial m}{\partial(-n)} = \lim_{\rho \rightarrow +0} \frac{m(R - \rho n) - m(R)}{\rho}$$
 – производная

вектора  $m$  по направлению вектора  $-n$  в точке поверхности с радиус-вектором  $R$ ;

$$\bar{K}_s = LK_s/(2A)$$

$K_s$  – коэффициент поверхностной анизотропии. С учетом, что вектор  $m \neq 0$ , а  $\partial m/\partial(-n) \perp m$  из равенства (2) следует равенство

$$\frac{\partial m}{\partial(-n)} = \bar{K}_s (m \cdot n)[n - (m \cdot n)m], \quad (3)$$

которое использовалось в настоящей работе в качестве граничного условия для уравнения (1). Заметим, что условия (2) и (3) не эквивалентны: если поле  $m$  удовлетворяет условию (3), то оно удовлетворяет и условию (2), но не любое поле  $m$ , удовлетворяющее (2), будет удовлетворять условию (3). Приведем пример записи условия (3) на правой и левой гранях

пластинки. Для правой грани (рис. 1):  $n = (1, 0, 0)$ ,  $m \cdot n = m^x$ ,  $\frac{\partial m}{\partial(-n)} = -\frac{\partial m}{\partial x} \Big|_{-}$  и условие (3) в координатах запишется

$$\frac{\partial m^x}{\partial x} \Big|_{-} = \bar{K}_s m^x \left( (m^x)^2 - 1 \right); \quad \frac{\partial m^y}{\partial x} \Big|_{-} = \bar{K}_s m^y (m^x)^2;$$

$$\frac{\partial m^z}{\partial x} \Big|_{-} = \bar{K}_s m^z (m^x)^2, \quad (4)$$

где символ  $\Big|_{-}$  обозначает левостороннюю производную. На левой грани  $n = (-1, 0, 0)$ ,  $m \cdot n = -m^x$ ,  $\frac{\partial m}{\partial(-n)} = \frac{\partial m}{\partial x} \Big|_{+}$  и условие (3) запишется формулами вида (4), только в левых частях будут правосторонние производные, а знаки правых частей изменятся на противоположные.

При численном решении задачи уравнение (1) аппроксимировалось на трехмерной сетке с постоянным пространственным шагом  $h$  обычной явной конечно-разностной схемой, с помощью которой вычислялось поле намагниченности  $m^{(p+1)}$  во внутренних узлах сетки на временном слое  $p+1$  по известным значениям  $m^{(p)}$ . Для вычисления  $m^{(p+1)}$  в регулярных (не лежащих на ребрах) узлах правой грани, первое из уравнений (4) аппроксимировалось конечно-разностным уравнением

$$\left( m_B^{x(p+1)} - m_{B-1}^{x(p+1)} \right) / h = \bar{K}_s m_B^{x(p+1)} \left( (m_B^{x(p)})^2 - 1 \right), \quad (5)$$

где нижний индекс  $B$  обозначает сеточный узел, лежащий на грани, а  $B-1$  – ближайший к нему внутренний узел, расположенный на расстоянии  $h$  от узла  $B$  (рис. 1). Из уравнения (5) получаем формулу для компоненты  $m_B^{x(p+1)}$ :

$$m_B^{x(p+1)} = m_{B-1}^{x(p+1)} \left( 1 - h \bar{K}_s \left( (m_B^{x(p)})^2 - 1 \right) \right). \quad (6)$$

Из второй и третьей формул (4) получаем формулы для  $m_B^{y(p+1)}$  и  $m_B^{z(p+1)}$ :

$$m_B^{y(p+1)} = m_{B-1}^{y(p+1)} \left\{ 1 - h \bar{K}_s (m_B^{x(p+1)})^2 \right\};$$

$$m_B^{z(p+1)} = m_{B-1}^{z(p+1)} \left\{ 1 - h \bar{K}_s (m_B^{x(p+1)})^2 \right\}, \quad (7)$$

где компонента  $m_B^{x(p+1)}$  в правых частях вычисляется по формуле (6). Формулы для вычисления компонент  $m^{(p+1)}$  на левой грани пластинки совпадают с формулами (6)-(7) с учетом, что точка  $B-1$  расположена правее граничной точки  $B$ . Аналогично получают формулы

лы для вычисления компонент  $m^{(p+1)}$  на других гранях. На ребрах компоненты  $m^{(p+1)}$  находились как среднее значение соответствующих компонент в ближайших регулярных сеточных узлах граней. В уравнении (5) было бы естественным везде записать компоненту  $m^x$  на временном слое  $p+1$ , однако такая аппроксимация приводит к кубическому уравнению для неизвестной величины  $m_B^{x(p+1)}$ , которое при  $\bar{K}_s > 0$  может иметь до трех действительных корней и потребуется вводить критерий выбора подходящего значения  $m_B^{x(p+1)}$ .

Для контроля решения и интерпретации получаемых результатов совместно с решением эволюционного уравнения (1) вычислялась свободная энергия системы  $W$ , выраженная в единицах  $M_s^2 L^3$ :

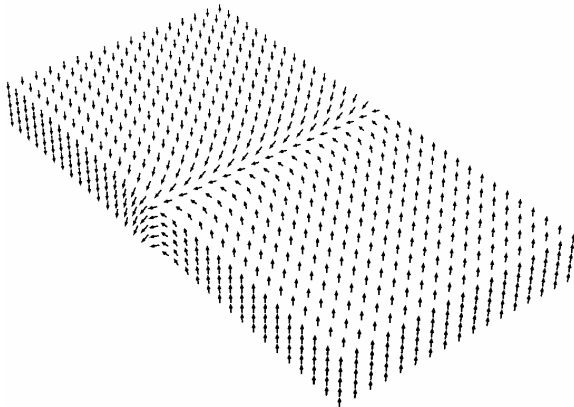


Рисунок 2. Доменная структура, полученная из начального состояния со случайным выбором векторов  $m$  и  $K_s = 0$

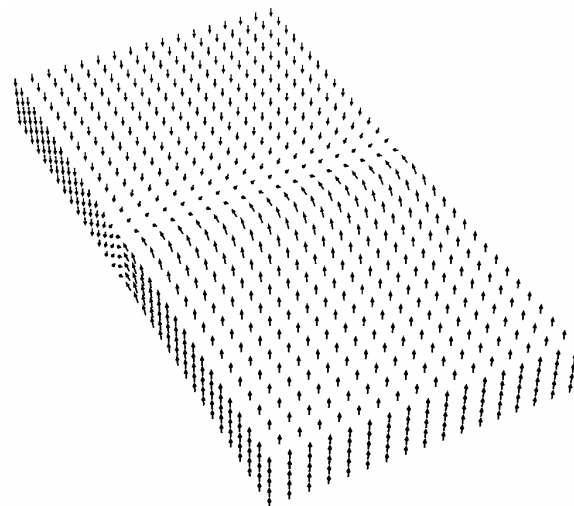


Рисунок 3. Изменение доменной границы в двухдоменной структуре (рис. 2) после «включения» поверхностной анизотропии

$$W = \iiint_V \left\{ \frac{A}{M_s^2 L^2} \left[ (\nabla m^x)^2 + (\nabla m^y)^2 + (\nabla m^z)^2 \right] + \left[ \frac{K_1}{M_s^2} (1 - (m \cdot w)^2) + \frac{K_2}{M_s^2} (1 - (m \cdot w)^2)^2 \right] + \frac{1}{2} m \cdot \nabla U \right\} dV + \iint_S \frac{K_s}{2M_s^2 L} (m \cdot n)^2 ds,$$

где интеграл по объему пластинки  $V$  представлен суммой энергии обмена ( $W_e$ ), энергии объемной анизотропии ( $W_a$ ) и энергии в собственном (магнитостатическом) поле ( $W_d$ ), а интеграл по поверхности пластинки  $S$  является энергией поверхностной анизотропии ( $W_s$ ).

### Пример моделирования

На рисунках 2 и 3 приведены результаты расчетов доменной структуры для пластинки  $Nd_2Fe_{14}B$  размером  $40 \times 20 \times 5$  нм со следующими параметрами:  $A = 1.7 \times 10^{-6}$  Эрг/см,  $M_s = 1275$  Гс,  $K_1 = 4.5 \times 10^7$  Эрг/см<sup>3</sup>,  $K_2 = 6.6 \times 10^6$  Эрг/см<sup>3</sup>,  $L = 5$  нм. Коэффициент поверхностной анизотропии вычислялся по формуле [7]:  $|K_s| = \pi M_s^2 l$ , где  $l = 10^{-6}$  см. В расчетах использовалось  $K_s > 0$ , что соответствует поверхностной анизотропии типа «легкая плоскость». В ходе выполнения расчетов использовалось проецирование решений с одной сетки на другую, наиболее мелкая из которых содержала  $161 \times 81 \times 21$  точек. На рисунках показана проекция векторных полей на крупную сетку.

Из размагниченного начального состояния, которое моделировалось случайным выбором векторов  $m$  в узлах сетки, большинство случайных выборок после установления равновесия приводят к двухдоменной структуре с  $W = 2.9 \times 10^2$ , показанной на рис. 2б. В некоторых случаях система приходит к однодоменному ( $W = 1.4 \times 10^2$ ) и трехдоменному ( $W = 4.5 \times 10^2$ ) состояниям, причем в последнем случае возможно вращение векторов в блоховских доменных границах как в одном направлении (рис. 2в), так и в противоположных. Если в этих состояниях «включить» поверхностную анизотропию  $K_s > 0$ , то однодоменная структура почти не изменяется. В двухдоменной структуре изменяется тип доменной границы: блоховская переходит в неелевскую с увеличением ширины границы (рис. 3). Изменение типа доменной границы ориентирует поле  $m$  на передней и задней гранях пластинки параллельно плоскости граней. Расширение границы увеличивает пло-

щадь на верхней и нижней гранях, где поле  $m$  ориентировано преимущественно параллельно этим граням. В результате увеличивается площадь, на которой поле  $m$  ориентировано преимущественно параллельно поверхности и поверхностная энергия  $W_s$  понижается от  $1.9 \times 10^2$  до  $1.8 \times 10^2$ . Изменение доменной границы приводит также к понижению энергии обмена  $W_e$  от 88 до 74 и росту энергии внутриобъемной анизотропии  $W_a$  от 92 до  $1.1 \times 10^2$ . Энергия в собственном поле  $W_d$  изменяется незначительно. Неожиданным оказалось влияние поверхностной анизотропии на трехдоменную структуру. Если в состоянии с одинаковым направлением вращения векторов «включить»  $K_s > 0$ , то метастабильное трехдоменное состояние теряет устойчивость и система переходит в однодоменное, сходное с показанным на рис. 2а. При этом поверхностная энергия  $W_s$ , равная  $1.7 \times 10^2$  в момент «включения»  $K_s$  сначала убывает, а затем растет до  $2.0 \times 10^2$ . «Включение»  $K_s > 0$  в трехдоменном состоянии с противоположным направлением вращения векторов  $m$  в доменных границах приводит только к изменению структуры границ. Качественно отличающееся поведение почти одинаковых трехдоменных структур можно объяснить их различным «запасом ус-

тойчивости» к возмущению, которое вносится включением  $K_s > 0$ . Естественно, что во всех описанных выше процессах эволюции свободная энергия системы  $W$  убывает.

### **Заключение**

Приведенный пример моделирования показывает, что в одном и том же образце возможны равновесные состояния на которые «включение» поверхностной анизотропии влияет по-разному: а) не оказывает заметного влияния, б) влияет только на структуру доменных границ, в) качественно изменяет вид доменной структуры. Причем трудно предвидеть, будет ли данная доменная структура существенно изменяться и в каком направлении. Для образцов с меньшей внутриобъемной анизотропией также были обнаружены примеры качественного влияния «включения» поверхностной анизотропии на доменную структуру, однако характер ее изменения был вполне предсказуем: поле намагниченности, преимущественно ортогональное поверхности пластинки, после «включения»  $K_s > 0$  ориентировалось в плоскость пластинки. Таким образом, учет поверхностной анизотропии может существенно влиять на результаты микромагнитного моделирования.

### **Список использованной литературы:**

1. Крюков И.И., Манаков Н.А. Микромагнетизм двухфазных квазиоднодоменных частиц // ФММ. – 1983. – Т. 56, вып. 1. – С. 5-8.
2. Крюков И.И., Манаков Н.А., Садков В.Б. Микромагнетизм двухфазных квазиоднодоменных сферических частиц // ФММ. – 1985. – Т. 59, вып. 3. – С. 455-462.
3. Крюков И.И., Манаков Н.А., Садков В.Б. Влияние поверхностной неоднородности на магнитное поведение мелких частиц // Физика магнитных материалов. – Калинин: Изд-во Калинин. ун-та, 1988. – С. 4-18.
4. Манаков Н.А., Лебедева И.В., Толстобров Ю.В. Численное моделирование процесса перемагничивания неоднородных цилиндрических квазиоднодоменных частиц // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2004. – №10. – С.119-122.
5. Храбров В.И., Оноприенко Л.Г., Шур Я.С. Доменная структура и магнитные свойства частиц  $YFeO_3$  ниже критического размера однодоменности // ЖЭТФ. – 1974. – Т. 67, вып. 1. – С. 344-350.
6. Манаков Н.А. Процессы перемагничивания быстроокаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков: Автореф. дис...докт. физ.-мат. Наук. – Екатеринбург, 1994. – 38 с.
7. Браун У. Ф. Микромагнетизм. М.: Наука, 1979. 160 с.
8. Толстобров Ю.В., Манаков Н.А. Микромагнитное моделирование распределения намагниченности в полубесконечных монокристаллах // ФММ. 2006. Т. 102. №6. С. 597-601.

**Manakov N.A., Tolstobrov Yu.V., Shiling G.S.**  
**MICROMAGNETIC MODELING OF SURFACE ANISOTROPY INFLUENCE ON BLAST FURNACE STRUCTURES IN NANNOPLATE**

The results of numeral modeling of blast furnace structures in nannoplate with surface anisotropy are presented in this article. It is shown that in the same example equilibrium conditions are possible, on which «turning on» of surface anisotropy influences in different ways: a) don't influence notably, b) influence only on the structure of blast furnace borders, c) change the type of blast furnace structures.

Key words: Micromagnetic modeling, blast furnace structure, surface anisotropy, nannoplate.

Сведения об авторах:

Манаков Николай Александрович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики физического факультета Оренбургского государственного университета, профессор, 460018, г. Оренбург, пр-т Победы, 13, к. 1302А, тел.: (3532) 37-24-39, e-mail: mna@house.osu.ru

Толстобров Юрий Вениаминович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики Бийского педагогического государственного университета им. В.М. Шукшина, доцент, Алтайский край, г. Бийск, ул. Короленко 53, тел.: (3854) 31-32-49, e-mail: agnty@yourline.ru