Манаков Н.А., Лебедева И.В., Толстобров Ю.В.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КВАЗИОДНОДОМЕННЫХ ЧАСТИЦ

В рамках теории микромагнетизма без учета магнитостатических полей рассеяния проведено численное моделирование процесса перемагничивания квазиоднодоменных цилиндрических частиц $SmCo_5$ с поверхностным слоем Co. Установлены зависимости полей разрушения однородно намагниченного состояния и коэрцитивной силы от размера частиц при фиксированной и переменной толщине поверхностного слоя в случае резкой и непрерывной границы между $SmCo_5$ и Co. Показано, что эти зависимости могут иметь качественно различный характер.

Основные представления о магнитном поведении идеально однородных квазиоднодоменных частиц были разработаны в 50-60-х годах Кондорским, Брауном и группой Фрея [1-3] и развиты позднее рядом авторов (см. [4, 5]).

Продолжением этих работ стали теоретические исследования неоднородных квазиоднодоменных частиц, проведенные в 90-х годах [6-10], в которых было изучено влияние поверхностной неоднородности на устойчивость их однородно намагниченного состояния (ОНС). При этом в рамках теории микромагнетизма в линейном приближении определялось лишь критическое поле разрушения ОНС. Анализ же всего процесса перемагничивания таких частиц пока не проводился.

Поэтому в настоящей работе в рамках теории микромагнетизма проведено моделирование всего процесса перемагничивания неоднородных неограниченных по длине цилиндрических частиц $SmCo_5$ с поверхностным слоем (ПС) Co. Геометрия задачи представлена на рисунке 1.

Граница между ядром частицы и поверхностным слоем аппроксимировалась либо резкой переходной областью, на которой магнитные параметры меняются скачком, либо непрерывной переходной областью, в которой магнитные параметры линейно изменяются от их значений в ядре частицы к значениям в поверхностном слое. Поверхностный слой частицы имеет толщину l, непрерывная переходная область – толщину D, а ось легкого намагничивания направлена по оси симметрии цилиндра.

Распределение намагниченности в цилиндрических координатах зададим в форме:

$$\lambda_1(\rho,\varphi,z) = -\sin\omega(\rho)\cdot\sin\varphi,\ \lambda_2(\rho,\varphi,z) = \sin\omega(\rho)\cdot\cos\varphi,\ \lambda_3(\rho,\varphi,z) = \cos\omega(\rho),$$

где $\omega(\rho)$ – угол между вектором намагниченности M_s и осью Z, зависящий только от ρ. В связи с огромной магнитной анизотропией соединения $SmCo_5$ в данном случае не учитывались: магнитоупругие эффекты, поверхностная энергия и энергия магнитостатических полей рассеяния. Тогда полную энергию на единицу длины цилиндра можно представить в виде:

$$W = 2\pi\int_0^P \rho d\rho\left\{A\left[\omega'^2 + \sin^2\omega/\rho^2\right] + K\sin^2\omega - HM_s\cos\omega\right\}, \qquad (1)$$

где $P = R + l$.

В исходном однородно намагниченном состоянии векторы намагниченности M_s ориентированы вдоль оси Z ($\omega[\rho] = 0$), а положительное направление внешнего магнитного поля H совпадает с направлением конечного однородно намагниченного состояния ($\omega[\rho] = \pi$). Реализующееся неоднородное распределение векторов намагниченности M_s определяется из условия минимума (1).

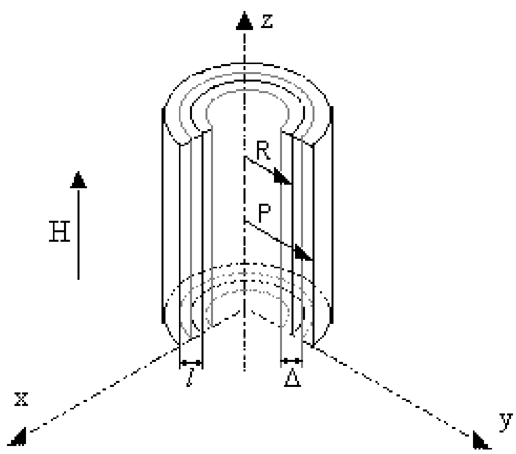

Рисунок 1. Геометрия неоднородной цилиндрической частицы $SmCo_5$ с поверхностным слоем Co.

Представим (1) в виде суммы интегралов:

$$W = 2\pi\int_0^P A(\rho)\rho\omega'^2 d\rho + 2\pi\int_0^P \left[A(\rho)/\rho + K(\rho)\rho\right]\sin^2\omega d\rho -$$

$$-2\pi H\int_0^P M_s(\rho)\rho\cos\omega d\rho. \qquad (2)$$

Заменим каждый интеграл (2) суммой, в пределе к нему сходящейся. Для аппроксимации используем формулу прямоугольников с центральным выбором точек.

Пусть A_1, K_1, M_{s1} – параметры ядра частицы, A_2, K_2, M_{s2} – параметры поверхностного слоя частицы. Зададим непрерывную переходную область, распределив половину ее длины на поверхностную часть ядра частицы, а вторую половину переходной области – на внутреннюю часть поверхностного слоя. Каждый из слоев частицы разобьем на n равных отрезков, т. е.

Тогда:

$$W \approx \sum_{i=0}^{n-1} 2\pi A_1\left(\rho_i + h_i/2\right)\left(\omega_{i+1}-\omega_i\right)^2/h_i +$$

$$+\sum_{i=n}^{2n-1} 2\pi\left(A_1 + A_\Delta(i-n)\right)\left(\rho_i + h_\Delta/2\right)\left(\omega_{i+1}-\omega_i\right)^2/h_\Delta +$$

$$+\sum_{i=n}^{3n-1} 2\pi A_2\left(\rho_i + h_2/2\right)\left(\omega_{i+1}-\omega_i\right)^2/h_2 +$$

$$+\sum_{i=0}^{3n-1} 2\pi h_1\left(K_1\left(\rho_i + h_i/2\right) + A_1/\left(\rho_i + h_i/2\right)\right)\cdot$$

$$\cdot\sin^2\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right) +$$

$$+\sum_{i=n}^{2n-1} 2\pi h_\Delta\left(\left(K_1 + K_\Delta(i=n)\right)\left(\rho_i + h_\Delta/2\right) +\right.$$

$$\left.+\left(A_1 + A_\Delta(i=n)\right)/\left(\rho_i + h_\Delta/2\right)\right)\sin^2\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right) +$$

$$+\sum_{i=2n}^{3n-1} 2\pi h_2\left(K_2\left(\rho_i + h_2/2\right) + A_2/\left(\rho_i + h_2/2\right)\right)\cdot$$

$$\cdot\sin^2\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right) -$$

$$-2\pi H\left(\sum_{i=0}^{n-1} M_{sl} h_i\left(\rho_i + h_2/2\right)\cos\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right) +\right.$$

$$\sum_{i=n}^{2n-1}\left(M_{sl} + M_{s\Delta}(i-n)\right)h_\Delta\left(\rho_i + h_\Delta/2\right)\cos\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right) =$$

$$\left.\sum_{i=2n}^{3n-1} M_{s2} h_2\left(\rho_i + h_2/2\right)\cos\left(\left(\omega_{i+1}+\omega_i\right)/2\right)\right), \qquad (3)$$

где h_1, h_D, h_2 – соответственно шаги разбиения отрезков [0; R-D/2], [R-D/2; R+D/2], [R+D/2; P].

В таком виде функционал W можно трактовать как функцию, определенную в (3n+1)-мерном пространстве обобщенных координат $\{\omega_i\}_{3n+1}$. Минимум этой функции соответствует минимуму функционала при предельном отображении пространства координат на множество функций $\{\omega(\rho)\}\infty$. Задача сводится к нахождению минимума функции (3n+1) переменных (3). Поиск локального минимума W реализуется методом наискорейшего градиентного спуска [11].

Вышеописанным способом производился расчет процесса перемагничивания частиц $SmCo_5$ с поверхностным слоем Co. Рассматривались следующие виды частиц:

1. Неоднородные цилиндрические частицы с резкой границей и фиксированной толщиной поверхностного слоя (l = 10 нм).
2. Неоднородные цилиндрические частицы с фиксированной толщиной непрерывной переходной области (D = 10 нм) и фиксированной толщиной поверхностного слоя (l = 10 нм).
3. Неоднородные цилиндрические частицы с определенным процентным содержанием от диаметра частицы толщины непрерывной переходной области и поверхностного слоя.

На рисунке 2 показаны зависимости полей разрушения однородно намагниченного состояния (H_0) и коэрцитивной силы (H_c) от диаметра частицы для случаев 1 и 2.

Как видно из рисунка, величины H_0 и H_c могут существенно отличаться (что не предполагалось в работах, опубликованных ранее), а зависимости $H_0(R)$ и $H_c(R)$ имеют качественное различие. Рост H_c и незначительное увеличение H_o с увеличением размера частицы определяется уменьшением относительного объема поверхностного слоя Co в ней, а последующее падение H_c обусловлено облегчением процесса перемагничивания ядра частицы неоднородным вращением намагниченности при размерах, больших критического размера абсолютной однодоменности (d_c).

На рисунке 3 представлены зависимости H_0 и H_c от размера частицы для случая 3. Как видно, H_0 резко уменьшается с ростом R, что обусловлено увеличением абсолютной толщины ПС и облегчением образования в нем зародыша перемагничивания. Зависимость H_c(R) характеризуется наличием одного (при l=0,02R) и двух (при l=0,2R) максимумов. Возможность появления таких максимумов прогнозировалась в предшествующих наших работах (см., например, [10]). По мере увеличения ПС зародыш перемагничивания все более локализуется в нем, а «выход» его в ядро частицы затрудняется. Максимум H_c соответствует свободному размещению зародыша обратной намагниченности (ЗОН) в ПС. Последующее падение коэрцитивной силы в первую очередь связано с увеличением толщины переходной области D (т.е. уменьшением градиента магнитных параметров в ней), а следовательно, облегчением выхода ЗОН в ядро частицы. Но наличие двух максимумов на зависимости H_c(R) кажется неожиданным.

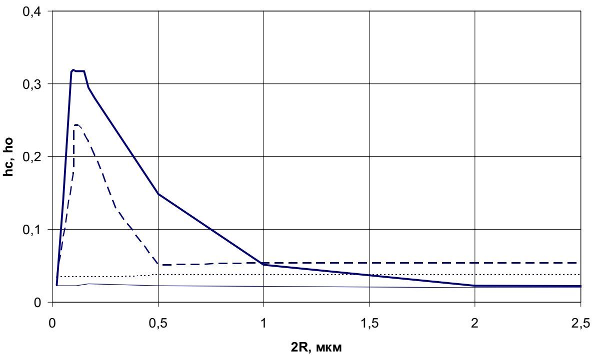

Рисунок 2. Зависимости h_o ($h_0=[H_o\text{Ч}M_{S1}]/[2K_1]$) и h_c ($h_c=[H_c\text{Ч}M_{S1}]/[2K_1]$) от диаметра неоднородных цилиндрических частиц с фиксированной толщиной поверхностного слоя l = 10 нм и резкой (D = 0) или непрерывной (D = 10 нм) переходной областью (— – $H_c(R)$ в случае резкой границы, - - - – $H_c(R)$ в случае непрерывной переходной области, s – поля разрушения однородно намагниченного состояния для случая резкой границы, ... – поля разрушения однородно намагниченного состояния для случая непрерывной переходной области $SmCo_5$).

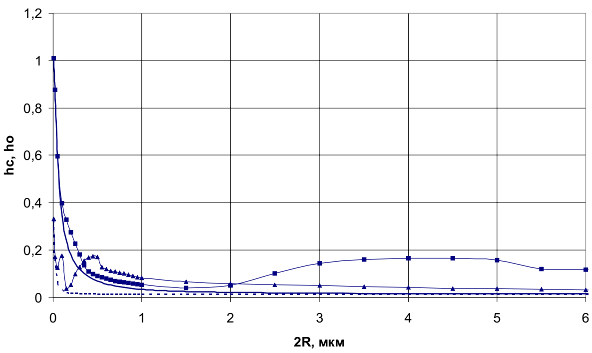

Рисунок 3. Зависимости h_0 и h_c от диаметра неоднородных цилиндрических частиц при толщине поверхностного слоя 0,2R (- - - -) и 0,02R (——) и непрерывной переходной области (D = 0,2R и 0,02R соответственно).

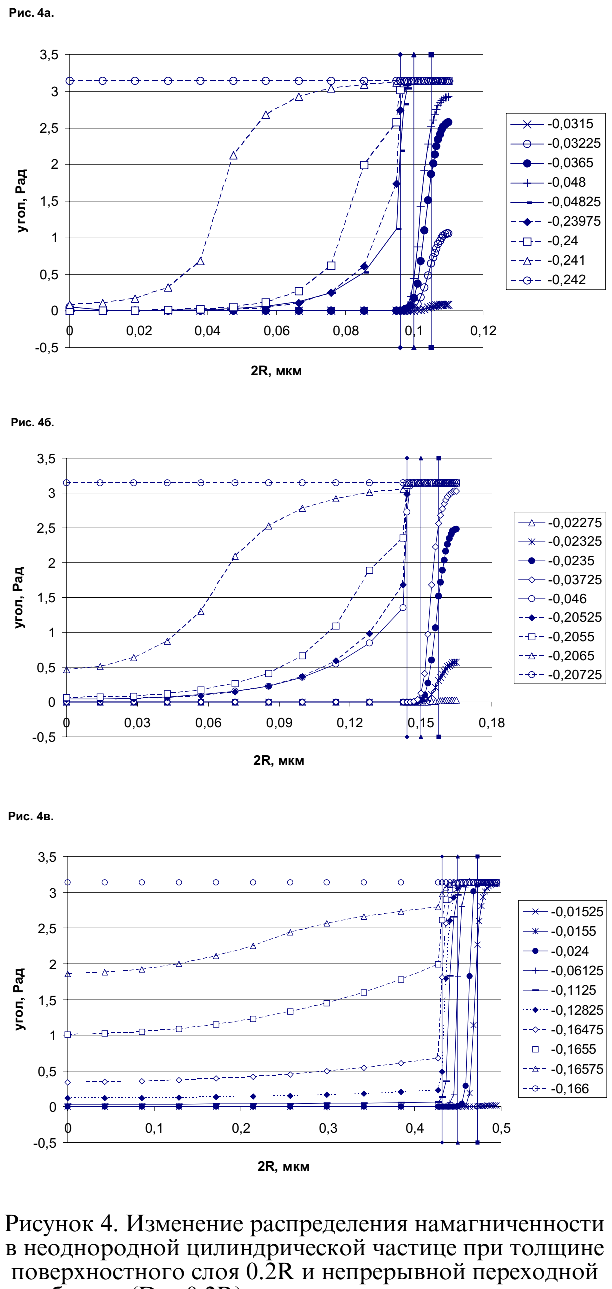

Рисунок 4. Изменение распределения намагниченности в неоднородной цилиндрической частице при толщине поверхностного слоя 0.2R и непрерывной переходной области (D = 0,2R) в процессе перемагничивания (◆ – начало ПО, ■ – конец ПО, ▲ – граница между ядром частицы и поверхностным слоем): а) 2R = 0,1 мкм, б) 2R = 0,15 мкм, в) 2R = 0,45 мкм.

Для объяснения такой зависимости $H_c(R)$ необходимо обратиться к кривым распределения намагниченности в частице, соответствующим первому (рис. 4а), второму (рис. 4в) максимумам и минимуму между ними (рис. 4б) H_c и соответствующим петлям гистерезиса (рис. 5а, в, б). У рисунков 4 справа в столбце указаны значения полей {в единицах $(HЧM_{S1})/(2K_1)$}, для которых показаны кривые распределения намагниченности в ядре и поверхностном слое частиц. На рисунках 5 значения полей также приведены в единицах $(HЧM_{S1})/(2K_1)$.

Рисунки 4, 5 свидетельствуют о том, что первый максимум на зависимости $H_c(R)$ при $l = 0{,}2R$ связан с относительно свободным размещением ЗОН в ПС и переходной области, а второй – с размещением ЗОН исключительно в ПС.

Таким образом, моделирование всего процесса перемагничивания неоднородных частиц показывает:

1. Численные значения полей разрушения однородно намагниченного состояния и полей перемагничивания неоднородных частиц могут очень сильно отличаться.

2. Зависимости поля разрушения однородно намагниченного состояния $H_o(R)$ и коэрцитивной силы $H_c(R)$ для неоднородных квазиоднодоменных частиц могут иметь качественно различный характер.

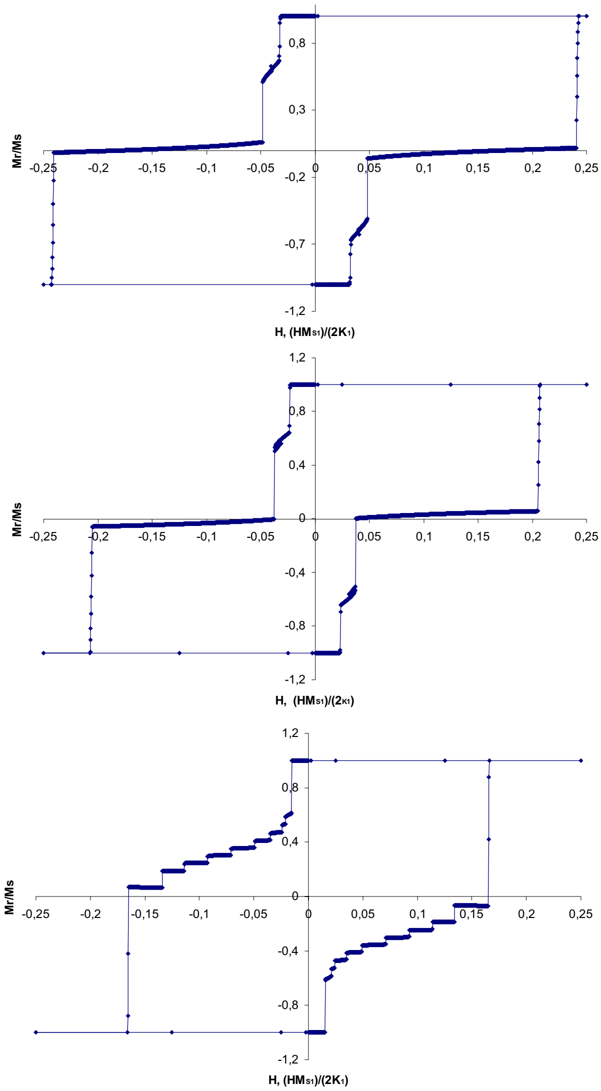

Рисунок 5. Петли гистерезиса неоднородной цилиндрической частицы при толщине поверхностного слоя $0{,}2R$ и непрерывной переходной области ($D = 0{,}2R$): а) $2R = 0{,}1$ мкм, б) $2R = 0{,}15$ мкм, в) $2R = 0{,}45$ мкм.

Список использованной литературы:

1. Кондорский Е.И. Природа высокой коэрцитивной силы мелкодисперсных ферромагнетиков и теория однодоменной структуры // Изв. АН СССР. Сер. физ. Т. 16. С. 398-411.
2. Браун У.Ф. Микромагнетизм. М., 1979.
3. Frei E.H., Shtrikman S., Treves D. Critical size and nucleation field of ideal ferromagnetic particles // Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 446-455.
4. Aharoni A. Magnetization curling // Phys. Stat. Sol. 1966. V. 16. P. 3-42.
5. Кандаурова Г.С., Оноприенко Л.Г. Доменная структура магнетиков. Основные вопросы микромагнетики: Учебное пособие. Свердловск, 1986.
6. Крюков И.И., Манаков Н.А. Микромагнетизм двухфазных квазиоднодоменных частиц // ФММ. 1983. Т. 56. С. 5-8.
7. Крюков И.И., Манаков Н.А., Садков В.Б. Микромагнетизм двухфазных квазиоднодоменных сферических частиц // ФММ. 1985. Т. 59. С. 455-462.
8. Крюков И.И., Манаков Н.А., Шилин В.М. Микромагнетизм двухфазных цилиндрических частиц // ФММ. Иркутск, 1984. С. 106-109.
9. Крюков И.И., Манаков Н.А., Садков В.Б. К вопросу о моде перемагничивания бесконечного двухфазного цилиндра $2R$ // Физика и техника магнитных явлений. Куйбышев, 1986. С. 6-11.
10. Крюков И.И., Манаков Н.А., Садков В.Б. Влияние поверхностной неоднородности на магнитное поведение мелких частиц // Физика магнитных материалов. Калинин, 1988. С. 4-18.
11. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Садков В.Б. Численные методы. М.: Наука, 1987. 600 с.