

# Микромагнитный расчет равновесного распределения магнитных моментов тонких пленок

© Б.А. Беляев<sup>1</sup>, А.В. Изотов<sup>2</sup>, Ан.А. Лексиков<sup>1</sup>

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,  
Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Сибирский федеральный университет,  
Красноярск, Россия

E-mail: belyaev@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 14 октября 2009 г.)

Предложен новый подход для определения равновесной конфигурации магнитных моментов в конденсированной среде из ее дискретной модели. Решение этой задачи сводится к системе линейных неоднородных уравнений с неопределенными множителями Лагранжа. С использованием модифицированного степенного метода показана возможность численного решения таких систем. Эффективность метода демонстрируется на модели тонкой магнитной пленки с неоднородным распределением по площади одноосной магнитной анизотропии. Исследовано поведение коэрцитивной силы от величины одноосной анизотропии нанокристаллитов, их обменного взаимодействия и других параметров образцов.

Работа поддержана грантом № 3818.2008.3 Президента РФ, интеграционным проектом № 5 СО РАН, проектом № 27.1 Президиума РАН, госконтрактами № 02.740.11.0220, № 02.740.11.0568.

## 1. Введение

Возросший в последнее время интерес к наноматериалам, в том числе и к магнитным [1], обусловлен большими потенциальными возможностями их практического применения. Развитие вычислительных возможностей современных компьютеров позволяет изучать свойства таких материалов, основываясь на численном решении задачи для моделей, отражающих микродискретность устройства среды. Результаты численных исследований особенно ценны в случаях, когда практически невозможно получить аналитическое решение системы. Эти факты стимулируют стремительный рост не только числа работ, посвященных исследованию свойств наноматериалов на основе их микромагнитных моделей [2–5], но и работ, посвященных развитию самих моделей и эффективным методам их расчета [6–8]. В частности, широкое распространение при численном моделировании магнитных сред получила модель на основе так называемой дискретно-дипольной аппроксимации. В соответствии с этой моделью дискретная среда рассматривается как совокупность магнитных диполей (моментов), под которыми в зависимости от уровня детализации и решаемой задачи могут пониматься как отдельные спины, так и магнитные моменты ячеек, на которые разбивается среда. В последнем случае в качестве ячеек можно рассматривать сами наночастицы, микрокристаллиты и иным образом сформированные области, в пределах которых магнитный момент предполагается однородным.

В рамках дискретно-дипольной модели решение ряда задач приводит к важной проблеме определения равновесного состояния или равновесной конфигурации распределения магнитных моментов. К числу таких

задач относятся задачи исследования статических магнитных характеристик сред, например, изучение доменной структуры [9] или расчет петель гистерезиса [10]. А также задачи исследования их динамических свойств, например, определение нормальных мод магнитных колебаний наночастиц [7,8] или расчет спектра поглощения спин-волнового резонанса [11]. Известно несколько различных подходов, позволяющих определить равновесную конфигурацию магнитных моментов [12], каждый из которых, как правило, ориентирован на решение определенного класса задач. Например, основанный на интегрировании методом Рунге–Кутты системы дифференциальных уравнений Ландау–Лифшица–Гильберта для каждой последующей конфигурации магнитных моментов, начиная со случайно заданной. Этот подход является наиболее общим, и он реализован в таких известных пакетах по микромагнитному моделированию, как OOMMF [13] и magpar [14], в которых можно изучать статические и динамические свойства системы. Несмотря на это, данный подход для определения равновесного состояния обладает рядом вычислительных недостатков. Во-первых, у него сравнительно низкая скорость, поскольку при получении конечного распределения магнитных моментов происходит вычисление всей эволюции магнитной системы во времени. Во-вторых, в вычислительном алгоритме необходимо предпринимать специальные меры для сохранения величины дипольных моментов постоянной.

Следующий подход, позволяющий получить конфигурации магнитных моментов, достаточно близкие к основному равновесному состоянию системы, основан на методе Монте-Карло. Однако в нем требуются большие затраты машинного времени уже при относительно небольшом количестве диполей в модели. Еще один подход основан на минимизации функционала энергии

рассматриваемой системы различными методами, например, методом релаксации или градиентного спуска. Наличие большого числа метастабильных состояний и нелинейности системы приводит к тому, что вычислительные процедуры крайне неустойчивы, могут иметь плохую сходимость или даже расходиться. Применение этого подхода также ограничено рассмотрением моделей с относительно небольшим количеством элементов.

Хорошие результаты по определению равновесной конфигурации магнитного состояния комплекса частиц дает подход, основанный на релаксации системы в соответствии с поведением ее внутренних эффективных магнитных полей, действующих на каждый диполь. Для этого последовательно или в случайном порядке рассчитывается локальное поле на определенном магнитном диполе  $i$ , в соответствии с действующими силами, устанавливается его новое положение. Вычисление продолжается до тех пор, пока не стабилизируются положения всех магнитных моментов. В большинстве случаев этот метод является более надежным и наиболее быстрым, однако возможны ситуации заикливания итерационных вычислений при возникновении скачков между двумя неустойчивыми состояниями [12]. Предложенный в настоящей работе метод по сути является обобщением последнего подхода. При этом метод лишен многих недостатков, например, возможного заикливания вычислений. Кроме того, поставленная задача определения равновесного состояния магнитных моментов сводится к задаче линейной алгебры, что в свою очередь позволяет применять эффективные численные методы для большого числа взаимодействующих диполей, в том числе использование разреженных матриц и параллельных вычислений при решении больших задач на многопроцессорных станциях.

## 2. Теоретическая часть

Рассмотрим ферромагнетик как дискретную среду, состоящую из  $N$  одинаковых магнитных диполей  $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), которые однородно заполняют весь объем рассматриваемого тела. Будем считать, что величина намагниченности насыщения  $M_s$  постоянна. Обозначая направление  $i$ -го диполя как  $\mathbf{M}^{(i)}$ , а его объем — как  $V_0$ , т.е.  $\boldsymbol{\mu}^{(i)} = M_s V_0 \mathbf{M}^{(i)}$ , можем записать выражение для свободной энергии данной системы  $F$  в виде суммы энергии Зеемана  $F_z$ , энергии обменного  $F_{\text{ex}}$  и дипольного  $F_{\text{dip}}$  взаимодействия, а также энергии одноосной  $F_a$  магнитной анизотропии

$$F = F_z + F_{\text{ex}} + F_{\text{dip}} + F_a,$$

$$F_z(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = -M_s V_0 \mathbf{H} \sum_{i=1}^N \mathbf{M}^{(i)},$$

$$F_{\text{ex}}(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = J V_0 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{Ni} (1 - \mathbf{M}^{(i)} \mathbf{M}^{(j)}),$$

$$F_{\text{dip}}(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = \frac{M_s^2 V_0^2}{2} \times \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{Ni} \left[ \frac{\mathbf{M}^{(i)} \mathbf{M}^{(j)}}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{M}^{(i)} \mathbf{r}^{(ij)})(\mathbf{M}^{(j)} \mathbf{r}^{(ij)})}{r_{ij}^5} \right],$$

$$F_a(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = -V_0 \sum_{i=1}^N K_i (\mathbf{M}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)})^2. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{H}$  — внешнее магнитное поле, приложенное к среде,  $J$  — постоянная обменного взаимодействия, при этом второй знак суммы по  $j$  в обменной энергии распространяется только на ближайших  $Ni$  соседей  $i$ -го диполя,  $\mathbf{r}^{(ij)}$  — вектор расстояния между  $i$  и  $j$  диполями, а  $r_{ij}$  — его длина,  $K_i$  — константа одноосной магнитной анизотропии,  $\mathbf{n}^{(i)}$  — единичный вектор, совпадающий с направлением оси легкого намагничивания.

Выражение для свободной энергии можно представить с помощью обобщенной матрицы взаимодействий, которая определяется только внутренними свойствами исследуемой магнитной среды. Для этого мы сначала введем тензор эффективного междипольного взаимодействия  $\overleftrightarrow{A}_{ij}$

$$\overleftrightarrow{A}_{ij} = \begin{cases} \overleftrightarrow{A}_{ii}^a, & i = j, \\ \overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{ex}} + \overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{dip}}, & i \neq j, \end{cases}$$

$$\overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{ex}} = \frac{2J}{M_s} E,$$

$$\overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{dip}} = -M_s V_0 \frac{1}{r_{ij}^3} \left[ E - \frac{3}{r_{ij}^2} \begin{pmatrix} r_x^{(ij)} \\ r_y^{(ij)} \\ r_z^{(ij)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_x^{(ij)} & r_y^{(ij)} & r_z^{(ij)} \end{pmatrix} \right],$$

$$\overleftrightarrow{A}_{ii}^a = \frac{2K_i}{M_s} \begin{pmatrix} n_x^{(i)} \\ n_y^{(i)} \\ n_z^{(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x^{(i)} & n_y^{(i)} & n_z^{(i)} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где  $E$  — единичная матрица размерностью  $3 \times 3$ ,  $\overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{ex}}$  — компоненты тензора, описывающего обменное взаимодействие ( $i$  и  $j$ -соседей),  $\overleftrightarrow{A}_{ij}^{\text{dip}}$  — компоненты тензора, описывающего диполь-дипольное (магнитостатическое) взаимодействие,  $\overleftrightarrow{A}_{ij}^a$  — компоненты тензора, описывающего анизотропию.

Тогда выражение для свободной энергии (1) с точностью до членов, не зависящих от  $\mathbf{M}^{(i)}$ , можно записать в виде

$$F(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = -M_s V_0 \sum_{i=1}^N \left[ \mathbf{H} \mathbf{M}^{(i)} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \mathbf{M}^{(i)} \overleftrightarrow{A}_{ij} \mathbf{M}^{(j)} \right]. \quad (3)$$

Вводя обобщенную матрицу взаимодействия  $A$ , а также обобщенный вектор диполей  $\mathbf{x}$  и внешнего воздействия  $\mathbf{b}$  как

$$A = \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{A}_{11} & \overleftrightarrow{A}_{12} & \dots & \overleftrightarrow{A}_{1N} \\ \overleftrightarrow{A}_{21} & \overleftrightarrow{A}_{22} & \dots & \overleftrightarrow{A}_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \overleftrightarrow{A}_{N1} & \overleftrightarrow{A}_{N2} & \dots & \overleftrightarrow{A}_{NN} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}^{(1)} \\ \mathbf{M}^{(2)} \\ \dots \\ \mathbf{M}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{H} \\ \dots \\ \mathbf{H} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

получим выражение свободной энергии в матричной форме

$$F(A, \mathbf{x}, \mathbf{b}) = -M_s V_0 \left( \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} \right). \quad (5)$$

В данном выражении префикс  $T$  означает транспонирование.

Таким образом, в рамках рассматриваемого нами подхода моделируемая среда описывается обобщенной матрицей  $A$ , значения элементов которой определяются внутренними свойствами самой среды и не зависят ни от внешних условий, ни от распределения в ней магнитных моментов.

Как известно, равновесной конфигурации распределения магнитных моментов соответствует минимум свободной энергии, т.е. равенство нулю ее вариации

$$\delta F(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = 0, \quad (6)$$

при дополнительном условии постоянства длины каждого диполя

$$\mathbf{M}^{(i)2} = M_x^{(i)2} + M_y^{(i)2} + M_z^{(i)2} = \text{const} = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (7)$$

Очевидно, что уравнение (7), с одной стороны, уменьшает количество независимых переменных с  $3N$  до  $2N$  в уравнении (6), а с другой — делает его нелинейным. Чтобы в этом убедиться, достаточно выбрать произвольную компоненту вектора  $\mathbf{M}^{(i)}$  и подставить в (6). При этом, как уже упоминалось во Введении, методы, основанные на минимизации функционала (1) с условием (7), находят ограниченное применение, поскольку являются крайне неустойчивыми.

Однако эта задача может быть решена другим способом, основанным на использовании метода неопределенных множителей Лагранжа. В этом случае необходимое условие равновесия может быть записано в виде системы [15]

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{M}^{(k)}} \left[ F + M_s V_0 \frac{\nu_k}{2} \mathbf{M}^{(k)2} \right] = 0, \quad (8)$$

где  $k = 1, 2, \dots, N$ ;  $\nu_k$  — постоянные множители Лагранжа;  $\delta/\delta \mathbf{M}^{(k)}$  — вариационная производная, которая в нашем случае равна  $\partial/\partial \mathbf{M}^{(k)}$ .

Введем эффективного локального магнитного поля

$$\mathbf{H}^{\text{eff}(k)} = -\frac{1}{M_s V_0} \frac{\delta F}{\delta \mathbf{M}^{(k)}} \quad (9)$$

система (8) преобразуется к виду

$$\mathbf{H}^{\text{eff}(k)}(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) - \nu_k \mathbf{M}^{(k)} = 0. \quad (10)$$

Физический смысл последних уравнений заключается в том, что каждый магнитный момент в состоянии равновесия совпадает по направлению с эффективным локальным магнитным полем, создаваемым как внешним полем, так и эффективными полями, обусловленными анизотропией и взаимодействием диполей, входящих в состав рассматриваемой системы. При этом коэффициент пропорциональности  $\nu_k$  обеспечивает постоянство длины магнитных моментов.

Поскольку входящие в выражение для свободной энергии (1) слагаемые, описывающие различные виды взаимодействия (за исключением энергии Зеемана), являются квадратичными формами относительно  $\mathbf{M}^{(i)}$ , система уравнений (10) является линейной. При этом единственное в (1) линейное выражение, описывающее взаимодействие с внешним магнитным полем, приводит к тому, что эта система (10) становится неоднородной. Чтобы в этом убедиться, запишем с учетом (9) выражение для эффективного локального магнитного поля

$$\mathbf{H}^{\text{eff}(k)}(\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \dots, \mathbf{M}^{(N)}) = \mathbf{H} + \sum_{j=1}^N \overleftrightarrow{A}_{kj} \mathbf{M}^{(j)}. \quad (11)$$

Введем диагональную матрицу  $D = \text{diag}(\nu_1, \nu_1, \nu_1, \nu_2, \nu_2, \dots, \nu_{3N})$ , состоящую из неопределенных множителей Лагранжа. Тогда с использованием обобщенной матрицы систему (10) можно представить в матричном виде

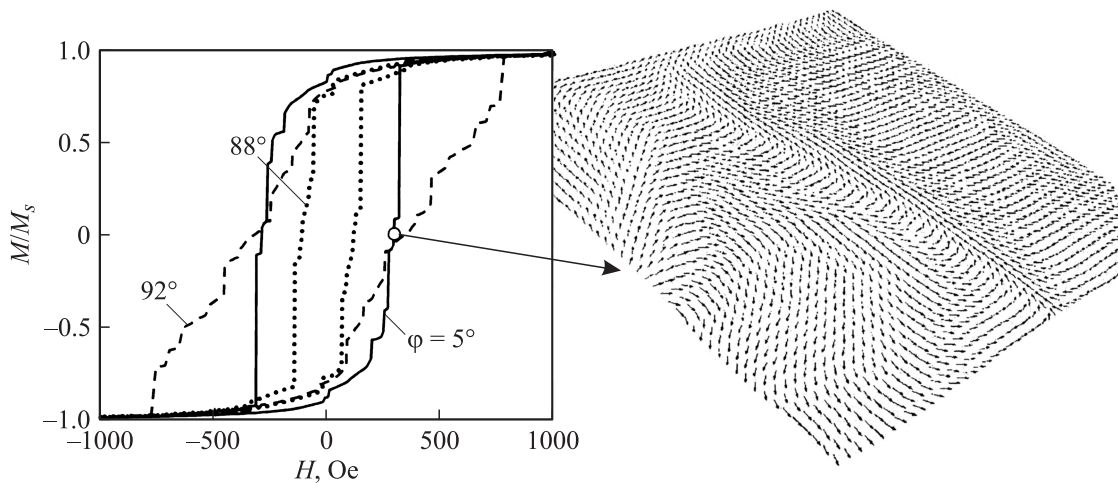
$$A \mathbf{x} - D \mathbf{x} = -\mathbf{b}. \quad (12)$$

Для решения данного матричного уравнения можно использовать развитые численные алгоритмы линейной алгебры. В качестве примера можно привести простейший алгоритм, представляющий собой небольшую модификацию степенного метода, используемого при решении частичной проблемы собственных значений [16]. Для этого сначала перепишем (12) в виде  $D \mathbf{x} = A \mathbf{x} + \mathbf{b}$  и, обозначая  $\mathbf{y} = D \mathbf{x}$ , получим итерационную схему

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{i+1} &= A \mathbf{x}_i + \mathbf{b}, \\ \mathbf{x}_{i+1} &= D_{i+1}^{-1} \mathbf{y}_{i+1}. \end{aligned} \quad (13)$$

При этом коэффициенты диагональной матрицы  $D_{i+1}^{-1}$  подбираются таким образом, чтобы выполнялось условие (7), а вычисления продолжаются до тех пор, пока не стабилизируются значения элементов вектора  $\mathbf{x}$ .

Необходимым условием сходимости и устойчивости (в том числе отсутствия закливания) этого итерационного процесса является положительная определенность матрицы  $A$ , т.е. когда ее квадратичная форма  $\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$  больше нуля [16]. В нашем случае этого всегда можно добиться, если вместо матричного уравнения (12) решать уравнение  $A' \mathbf{x} - D' \mathbf{x} = \mathbf{b}$ , где  $A' = A + \xi E$ ,  $D' = D + \xi E$ ,



**Рис. 1.** Петли гистерезиса для структуры со случайным распределением осей анизотропии диполей, построенные при различных углах ориентации магнитного поля в пленке размерностью  $50 \times 50$ . Справа показана равновесная конфигурация магнитных моментов в постоянном магнитном поле  $H = 250$  Oe.

а  $E$  — единичная матрица. Выбрав подходящим образом  $\xi > 0$ , получим положительно определенную матрицу  $A'$ .

Следует отметить, что данный алгоритм не обладает быстрой сходимостью, тем не менее в большинстве случаев эта скорость может многократно превышать скорость других методов. В случае матрицы  $A$  большой размерности, а также в случае, когда она является сильно разреженной (например, если в модели не учитывается диполь-дипольное взаимодействие или оно учитывается частично), следует использовать другие, более эффективные алгоритмы.

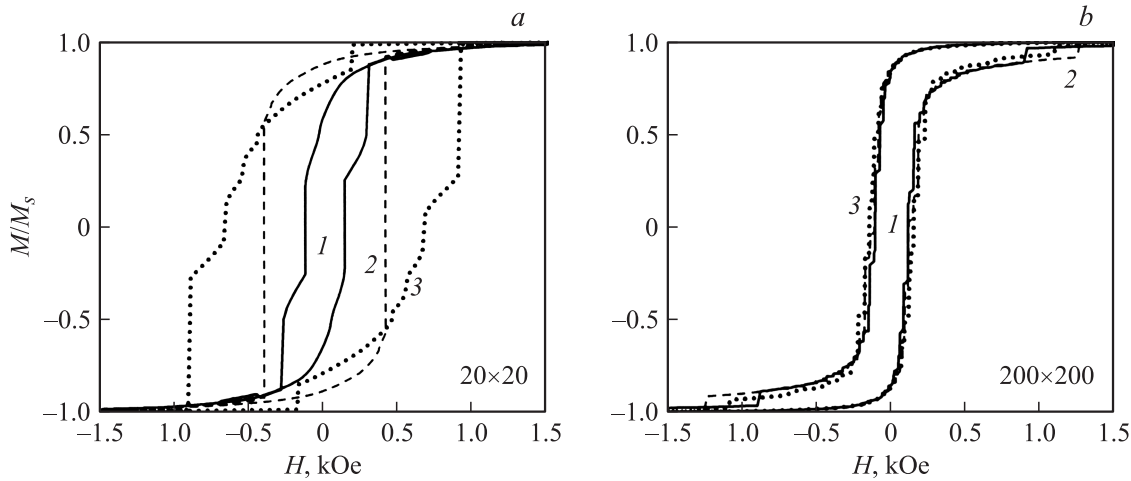
### 3. Результаты численного моделирования

Эффективность предложенного подхода была апробирована нами на пленках, представляющих собой монослой магнитных наночастиц размерностью  $n \times n$  со случайным распределением осей анизотропии. Для сравнения и оценки надежности расчета модель тонкопленочного образца и значения параметров наночастиц, образующих его, были взяты из работы [9], в которой методом Монте-Карло получено равновесное распределение магнитных моментов в пленке никеля из плотноупакованных гранул. В цитируемой работе пренебрегалось дисперсией размеров частиц и считалось, что гранулы имеют размеры  $2.5$  nm, т.е. в них, по оценке авторов, должно содержаться  $\sim 600$  атомов. Также предполагалось, что контакт между частицами характеризуется наличием туннельных барьеров, что приводит к ослаблению обменного взаимодействия, характеризуемого эффективной постоянной обменного взаимодействия  $J^{\text{eff}}$ . Считалось, что частицы имеют намагниченность насыщения  $M_s = 495$  G и константу

одноосной магнитной анизотропии  $K_u = 8 \cdot 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>. Сравнение полученных нами равновесных распределений магнитных моментов в рассмотренных образцах [17] с соответствующими данными работы [9] демонстрирует хорошее согласие при всех соотношениях  $J^{\text{eff}}/K_u$  для случайного распределения осей анизотропии наночастиц не только в плоскости образца, но и в пространстве.

Разработанный подход к определению основного состояния дискретной модели ферромагнетика позволяет не только находить равновесное распределение магнитных моментов для любых заданных параметров исследуемой структуры, но и изучить процессы ее перемагничивания. В качестве примера на рис. 1 показаны петли гистерезиса монослойной пленки кобальта, содержащей  $50 \times 50$  кристаллитов размерами  $2.5$  nm для одного из случайных распределений осей анизотропии в плоскости, рассчитанные при различных углах  $\phi$  ориентации планарного намагничивающего поля. В расчете предполагалось, что поле анизотропии отдельного диполя  $H_k = 3.5$  kOe, его намагниченность насыщения  $M_s = 1250$  G, а постоянная обменного взаимодействия  $J = 10^8$  erg/cm<sup>3</sup>, при этом диполь-дипольное взаимодействие (ДДВ) между частицами учитывалось до расстояния, равного восьми радиусам корреляции обмена  $R$ .

Видно, что величина коэрцитивной силы и сама форма петель гистерезиса в значительной степени определяются направлением постоянного магнитного поля, угол ориентации которого измерялся относительно одной из сторон квадратного образца. Наличие скачков на петлях гистерезиса связано с преодолением энергетических барьеров, величина и количество которых зависят не только от конкретного распределения осей анизотропии в системе диполей, но и от направления перемагничивающего поля. Справа на рис. 1 представлено равновесное распределение магнитных моментов исследуемой пленки в поле  $250$  Oe, которое для  $\phi = 5^\circ$  практически

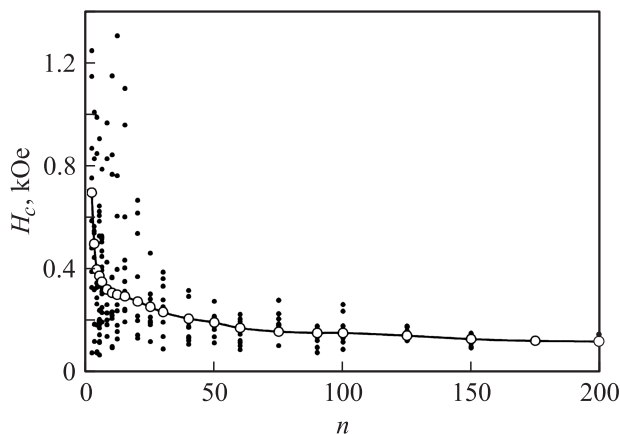


**Рис. 2.** Петли гистерезиса, построенные для трех случайных распределений осей анизотропии в пленке размерностью  $20 \times 20$  (a) и  $200 \times 200$  (b) диполей.

совпадает с коэрцитивной силой образца  $H_c$ . В этом случае суммарная проекция магнитных моментов диполей на направление перемещающегося поля близка к нулю. На рисунке хорошо просматриваются прообразы доменов — области, в которых магнитные моменты диполей практически параллельны друг другу.

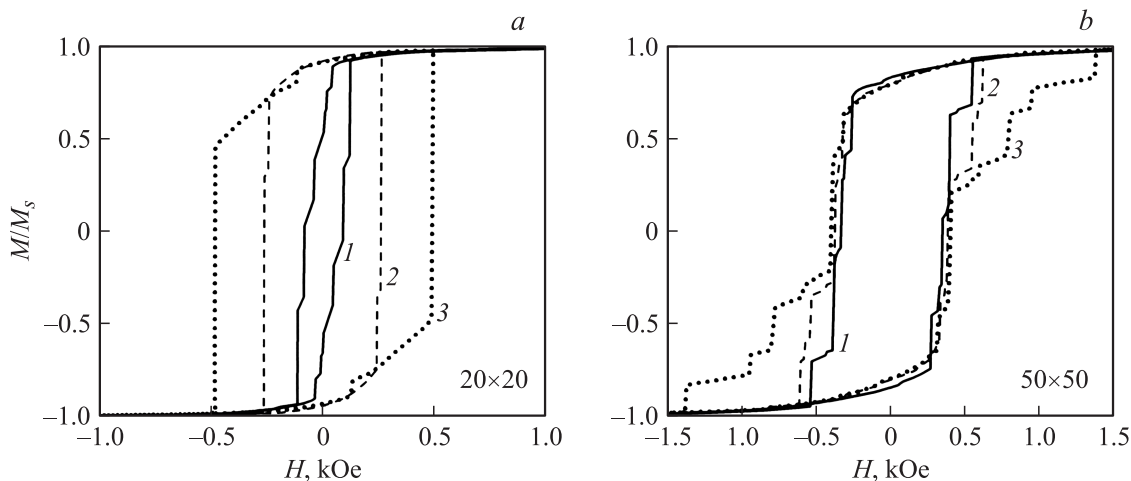
Очевидно, что коэрцитивная сила тонкопленочного образца должна зависеть от конкретного распределения направлений осей легкого намагничивания (ОЛН) в кристаллитах, образующих магнитную пленку. Причем чем меньше размерность пленки, тем больший разброс в значениях коэрцитивной силы должен наблюдаться для различных случайных распределений ОЛН в ее диполях, получаемых с помощью генератора случайных чисел. Этот вывод демонстрируют петли гистерезиса, представленные на рис. 2 для пленок размерностью  $20 \times 20$  диполей (a) и  $200 \times 200$  диполей (b). В исследовании

были отобраны петли гистерезиса с минимальной (1), максимальной (3) и средней (2) коэрцитивной силой, которые получились численным расчетом для множества случайных распределений осей анизотропии в кристаллитах пленок. Перемагничивание проводилось планарным полем, направленным вдоль одной стороны квадратных образцов ( $\varphi = 0$ ). При этом размеры и магнитные параметры диполей имели те же характеристики, что и в предыдущем исследовании. Видно, что с увеличением размерности пленки уменьшается не только средняя величина коэрцитивной силы, но и ее разброс. Эта закономерность хорошо видна из рис. 3, где темными точками представлены значения коэрцитивной силы однослойных магнитных пленок с различной размерностью, в каждом случае построенные для десяти различных случайных распределений осей анизотропии в кристаллитах.

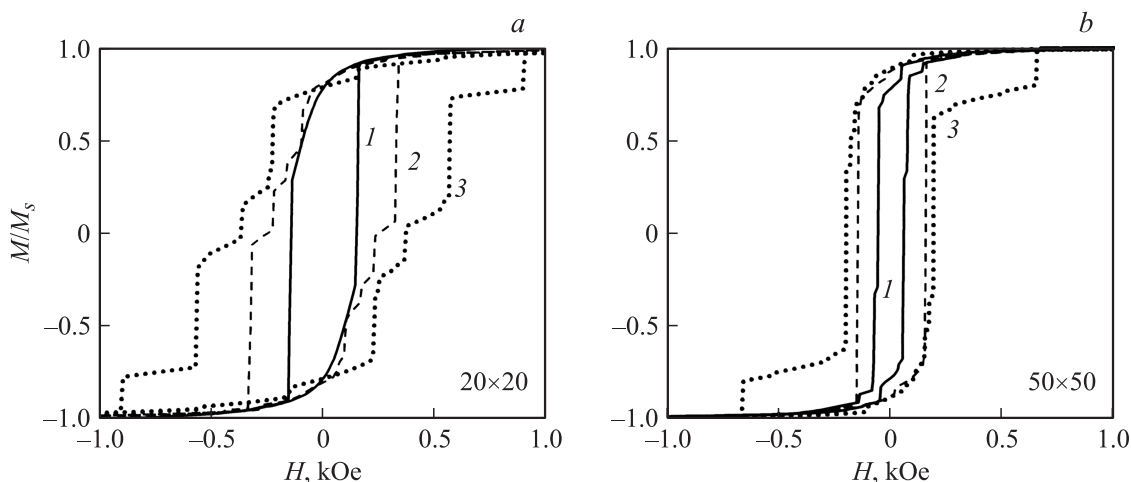


**Рис. 3.** Зависимость коэрцитивной силы от размерности магнитной пленки для множества случайных распределений осей анизотропии диполей (темные точки). Светлые точки — усредненные значения коэрцитивной силы.

На рис. 4 показано изменение петель гистерезиса пленок размерностью  $20 \times 20$  (a) и  $50 \times 50$  (b) нанокристаллитов от величины ДДВ между ними. В каждом варианте кривые построены для одного фиксированного случайного распределения осей анизотропии наночастиц в случае отсутствия ДДВ между нанокристаллитами (кривая 1), а также в случаях, когда ДДВ учитывается до расстояния двух радиусов обменного взаимодействия  $2R$  (2) и до расстояния  $10R$  (3). Отметим, что петли гистерезиса 3 для исследуемых пленочных структур практически не изменяются при дальнейшем увеличении расстояния, на котором учитывается ДДВ. Для удобства сравнения результатов размеры и все магнитные параметры нанокристаллитов были оставлены теми же, что и в предыдущем исследовании. Видно, что наличие ДДВ между кристаллитами в пленке затрудняет ее перемагничивание, что приводит к росту как коэрцитивной силы, так и поля насыщения. Причем с увеличением размерности пленки зависимость коэрцитивной



**Рис. 4.** Петли гистерезиса пленок размерностью  $20 \times 20$  (a) и  $50 \times 50$  (b) диполей, построенные для одного случайного распределения осей анизотропии частиц в случае отсутствия ДДВ между ними (1), а также в случаях, когда ДДВ учитывается до расстояния  $2R$  (2) и  $10R$  (3).



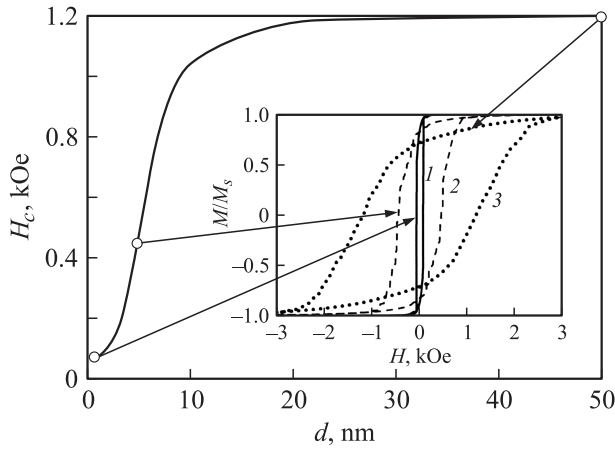
**Рис. 5.** Петли гистерезиса пленок размерностью  $20 \times 20$  (a) и  $50 \times 50$  (b) диполей, построенные для одного выбранного варианта случайных распределений осей анизотропии кристаллитов при поле анизотропии диполей 0.1 (1), 4.0 (2) и 6.0 кОе (3).

силы от ДДВ быстро падает, однако зависимость поля насыщения остается практически той же.

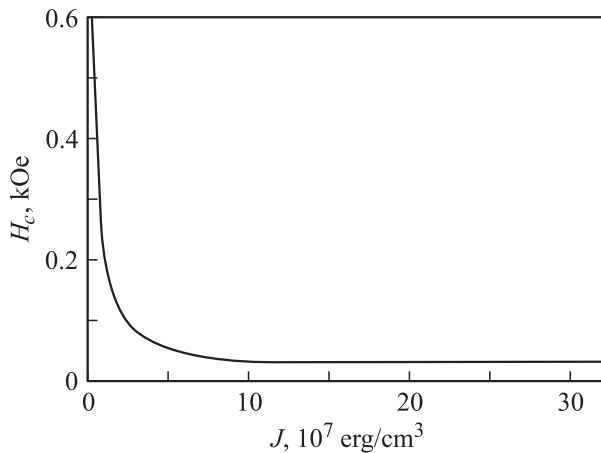
На рис. 5 показано изменение петель гистерезиса пленок размерностью  $20 \times 20$  (a) и  $50 \times 50$  (b) диполей от величины одноосной магнитной анизотропии. Кривые построены также для одного фиксированного варианта случайных распределений осей анизотропии кристаллитов с учетом ДДВ между ними до расстояния  $8R$ . Кроме того, неизменными оставались магнитные характеристики и размеры наночастиц, а величина полей анизотропии в кристаллитах была выбрана следующей: 0.1 (кривые 1), 4.0 (2) и 6.0 кОе (3). Как и следовало ожидать, увеличение поля анизотропии приводит к монотонному росту не только коэрцитивной силы, но и поля насыщения образцов, причем эта закономерность проявляется независимо от размерности пленки. Кроме того, проведенное исследование показало, что с ростом

размерности структуры быстро уменьшается не только величина коэрцитивной силы, но и величина поля насыщения.

На рис. 6 показана зависимость коэрцитивной силы от линейного размера кристаллитов-гранул  $d$ , которые образуют однослойную магнитную пленку размерностью  $50 \times 50$  диполей. Как и ранее, в расчете предполагалось, что поле анизотропии отдельного диполя  $H_k = 3.5$  кОе, его намагниченность насыщения  $M_s = 1250$  G, а константа обмена  $A = J \times d^2 = 5 \cdot 10^{-7}$  erg/cm, при этом ДДВ между частицами учитывалось до расстояния, равного восьми радиусам корреляции обмена. Видно, что коэрцитивная сила растет с увеличением  $d$ , однако на начальном участке при  $d < 2$  nm она почти не изменяется, как и на участке при  $d > 20$  nm, где  $H_c$  достигает насыщения. Такое поведение коэрцитивной силы обусловлено тем, что сильное, но „короткодействующее“ обменное



**Рис. 6.** Зависимость коэрцитивной силы от размера кристаллитов в пленке размерностью  $50 \times 50$ . На вставке — петли гистерезиса для  $d = 1$  (1), 5 (2) и 50 nm (3).



**Рис. 7.** Зависимость коэрцитивной силы от постоянной обменного взаимодействия для пленки размерностью  $50 \times 50$ .

взаимодействие заставляет магнитные моменты всех диполей выстроиться параллельно друг другу лишь в случае, когда их размеры существенно меньше радиуса корреляции. При этом разброс направлений осей анизотропии всех диполей, попадающих в область обменного взаимодействия, по существу нивелирует кристаллографическую анизотропию этой области. Именно поэтому в нанокристаллических и „рентгеноаморфных“ магнитных пленках [1] мала не только коэрцитивная сила при перемагничивании в любом направлении, но и поле насыщения. Этот вывод демонстрирует петля гистерезиса, показанная линией 1 на вставке к рис. 6, построенная для пленки с размерами кристаллитов  $d = 1$  nm. С увеличением  $d$ , как показали исследования, наблюдается быстрый одновременный рост как коэрцитивной силы, так и поля насыщения.

Исследование поведения магнитных характеристик образцов при варьировании величины обменного взаимодействия наночастиц в рассматриваемой пленке по-

казало стремительное уменьшение коэрцитивной силы и поля насыщения образцов, но лишь на начальном участке увеличения постоянной обменного взаимодействия  $J$  в интервале  $0 - 2 \cdot 10^7$  erg/cm<sup>3</sup> (рис. 7). Дальнейший рост обмена приводит к насыщению этих характеристик при  $J > 3 \cdot 10^7$  erg/cm<sup>3</sup>. В этом исследовании были зафиксированы размеры кристаллитов магнитной пленки  $d = 2.5$  nm и предполагалось, что поле анизотропии отдельного диполя  $H_k = 3.5$  kOe, его намагниченность насыщения  $M_S = 1250$  G, а ДДВ между частицами учитывалось до расстояния, равного восьми радиусами корреляции обмена.

## 4. Заключение

Таким образом, предложен новый подход к определению равновесной конфигурации магнитных моментов в дискретной модели ферромагнетика. Показано, что эта задача может быть сведена к задаче линейной алгебры, а для ее решения могут использоваться развитые численные алгоритмы, что позволяет моделировать системы с большим числом взаимодействующих диполей. При этом возможно использование эффективных алгоритмов работы с разреженными матрицами в случае пренебрежения диполь-дипольным взаимодействием магнитных моментов в модели или при его частичном учете, а также параллельных вычислений при решении больших задач на многопроцессорных станциях.

Для решения сформулированной линейной задачи приведен сравнительно простой численный алгоритм, который является модификацией известного степенного метода, используемого для решения частичной проблемы собственных значений. Эффективность метода и справедливость получаемых решений доказывают хорошее согласие результатов расчета с ранее проведенными расчетами в работе [9] на примере численного моделирования равновесного распределения магнитных моментов в тонкой нанокристаллической пленке со случайным распределением осей анизотропии в гранулах.

Разработанный численный расчет дает возможность изучать не только магнитную микроструктуру тонкопленочных образцов, образованных диполями нанокристаллических размеров, но и получать петли гистерезиса для различных ориентаций магнитного поля, проводить исследование процессов перемагничивания пленок. В настоящей работе на примере монослойных нанокристаллических пленок квадратной формы изучены основные закономерности их перемагничивания, исследовано поведение коэрцитивной силы при варьировании поля одноосной магнитной анизотропии, энергии обменного и диполь-дипольного взаимодействия, размеров нанокристаллитов, а также размерности  $n$  самих образцов. Наглядно продемонстрирована возможность наблюдения процессов образования доменов и доменных стенок в исследуемых образцах.

Важно заметить, что отлаженная программа анализа микромагнитной структуры нанокристаллических объектов имеет удобный интерфейс и в принципе позволяет проводить исследование не только пленочных, но и объемных материалов произвольной размерности в трех направлениях. Это дает возможность изучать влияние размагничивающих полей самого исследуемого образца на процессы его перемагничивания.

## Список литературы

- [1] Б.А. Беляев, А.В. Изотов, С.Я. Кипарисов, Г.В. Скомооров. *ФТТ* **50**, 650 (2008).
- [2] W. Scholz, D. Suess, T. Schrefl, J. Fidler. *J. Appl. Phys.* **95**, 6807 (2004).
- [3] R.P. Boardman, H. Fangohr, M.J. Fairman, J. Zimmermann, S.J. Cox, A.A. Zhukov, P.A.J. de Groot. *J. Magn. Magn. Mater.* **312**, 234 (2007).
- [4] M. Kisielewski, A. Maziewski, V. Zablotskii, W. Stefanowicz. *Physica B* **372**, 316 (2006).
- [5] O. Nedelko, P. Didukh, A. Slawska-Waniewska. *J. Magn. Magn. Mater.* **254–255**, 281 (2003).
- [6] E.O. Kamenetskii. *Phys. Rev. E.* **63**, 066 612 (2001).
- [7] M. Grimsditch, L. Giovannini, F. Monotcello, F. Nizzoli, G.K. Leaf, H.G. Kaper. *Phys. Rev. B* **70**, 054 409 (2004).
- [8] K. Rivkin, L.E. DeLong, J.B. Ketterson. *J. Appl. Phys.* **97**, 10E309 (2005).
- [9] Д.С. Ильющенко, В.И. Козуб, И.Н. Ясиевич. *ФТТ* **49**, 1853 (2007).
- [10] С.В. Колмогорцев, Р.С. Исхаков. *ФТТ* **47**, 480 (2005).
- [11] K. Rivkin, J.B. Ketterson. *J. Magn. Magn. Mater.* **306**, 204 (2006).
- [12] K. Rivkin, A. Heifetz, P.R. Sievert, J.B. Ketterson. *Phys. Rev. B* **70**, 184 410 (2004).
- [13] M.J. Donahue, D.G. Porter. Interagency Report NISTIR 6376. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1999).
- [14] W. Scholz, J. Fidler, T. Schrefl, D. Suess, R. Dittrich, H. Forster, V. Tsiantos. *Comp. Mater. Sci.* **28**, 366 (2003).
- [15] Ф.М. Морс, Г. Феербах. *Методы теоретической физики*. ИЛ, М. (1958). Т. 1. 931 с.
- [16] Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. *Матричные вычисления*. Мир, (1999). 548 с.
- [17] А.В. Изотов, Б.А. Беляев. *Изв. вузов. Физика* **51**, 9/2, 180 (2008).