Секция 4. Пучковые методы формирования наноматериалов и наноструктур

ФОРМИРОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУР В КОМПРЕССИОННОЙ ПЛАЗМЕ И ИХ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Н.Т. Квасов, И.Л. Дорошевич

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь, тел. 293-86-13, e-mail: kvasov@bsuir.by, dorochevich@bsuir.by

Представлены результаты исследования поведения магнитной структуры ферромагнитных наночастиц железа сферической формы радиусами 5–30 нм во внешнем магнитном поле методом компьютерного моделирования. Проведен анализ петель гистерезиса и образование вихревой структуры намагниченности для частиц различных размеров. Установлен размерный эффект в изменении симметрии намагниченности – аналог фазового перехода второго рода. Расчеты проводились с помощью пакета микромагнитного моделирования Nmag.

Введение

Одними из самых перспективных способов получения наноструктур, применяемых в микро-, нано- и оптоэлектронике, являются методы с использованием компрессионной плазмы. Ранее нами сообщалось [1], что воздействие компрессионного плазменного потока на кремний с введением в плазму металлического порошка (Fe, Ni, Co) приводит к формированию на поверхности мишени наноструктурированного однородного покрытия, представляющего собой слой сферических ферромагнитных наночастиц, которые могут использоваться качестве битовых ячеек новых устройств магнитной записи и хранения информации со сверхвысокой плотностью, высокочувствительных сенсоров и датчиков в бионанотехнологиях, медицине и др. Поскольку принцип действия этих устройств в большинстве случаев основан на тонкой перестройке распределения намагниченности в нанообъекте под воздействием внешнего магнитного поля, то исследование магнитной структуры наноразмерных частиц в настоящее время является исключительно актуальным.

Микромагнитное моделирование

Согласно экспериментальным данным [2] сферические ферромагнитные наночастицы обладают одноосной анизотропией независимо от того, какой тип симметрии имеет тот же материал в массивном образце. В этом случае свободную энергию Гиббса можно представить в виде [3]:

$$E_{tot} = E_{exch} + E_{demag} + E_{anis}^{uni} + E_{anis}^{surf} + E_{ext}$$
 ,

где

$$E_{exch} = \int_{(V)} \frac{A}{M_s^2} \left(\nabla \vec{M} \right)^2 dV = \int_{(V)} A \left(\nabla \vec{m} \right)^2 dV ,$$

– энергия обменного взаимодействия, A – постоянная обменного взаимодействия, \vec{M} – вектор намагниченности, M_s – намагниченность насыщения, $\vec{m} = \vec{M} / M_s$ – единичный вектор намагниченности;

$$E_{demag} = -rac{\mu_0}{2} \int\limits_{(V)} \left(\vec{M} \cdot \vec{H}_{demag}
ight) dV$$
 — магнитостати-

ческая энергия, μ_0 – магнитная постоянная, \vec{H}_{demag} – напряженность собственного размагничивающего поля;

$$E_{anis}^{uni} = \int_{(V)} K_u \sin^2 \theta \, dV \, ,$$

– энергия одноосной магнитной анизотропии,
 K_u – константа анизотропии, θ – угол между намагниченностью и осью легкого намагничивания;

$$E_{anis}^{surf} = \frac{1}{2} \oint_{(S)} K_s \left(\vec{n}, \vec{m}\right)^2 dS$$

– энергия поверхностной анизотропии, *K_s* – константа поверхностной анизотропии, *n* – единичный вектор нормали к поверхности;

$$E_{ext} = -\mu_0 \int_{(V)} \left(\vec{M} \cdot \vec{H}_{ext} \right) dV ,$$

– энергия частицы во внешнем магнитном поле напряженностью \vec{H}_{ext} .

В настоящей работе расчет магнитной структуры проводится с помощью пакета микромагнитного моделирования Nmag с гибким методом конечных элементов с пользовательским интерфейсом на основе языка программирования Руthon [4]. Алгоритм расчета Nmag основан на численном решении уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\frac{|\gamma|}{1+\alpha^2}\vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{|\gamma|\alpha}{(1+\alpha^2)M_s}\vec{M} \times \left[\vec{M} \times \vec{H}_{eff}\right],$$

где γ – гиромагнитное отношение электрона; α – параметр затухания; \vec{H}_{eff} – напряженность эффективного поля, являющаяся вариационной производной объемной плотности энергии \mathcal{E}_{ort} по отношению к намагниченности:

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\delta \mathcal{E}_{tot}}{\delta \vec{M}} \ .$$

Магнитная структура и процессы перемагничивания

В качестве объектов исследования были выбраны ферромагнитные наночастицы железа сферической формы с радиусами 5–25 нм (с шагом 1 нм) и 30 нм. Выбор объектов определялся следующим: 1) железо является одним из основных ферромагнитных материалов; 2) наибольшее значение критического радиуса R_0 сферической ферромагнитной частицы, при котором ее однородная намагниченность в процессе перемагничивания во внешнем магнитном поле сохраняет-

¹⁰⁻я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом», 24-27 сентября 2013 г., Минск, Беларусь 10th International Conference "Interaction of Radiation with Solids", September 24-27, 2013, Minsk, Belarus

ся, полученное Е.И. Кондорским [5], равно

$$R_0 = 0.95 \sqrt{\frac{30A}{\mu_0 M_s^2}}$$

и для железа составляет 12,5 нм.

При расчетах использовались следующие значения параметров: $M_S = 1,7 \cdot 10^6$ А/м, $\alpha = 0,5$, $A = 2,1 \cdot 10^{-11}$ Дж/м³, $K_a = 4,2 \cdot 10^4$ Дж/м³. Построение пространственной сетки счета проводилось методом конечных элементов, средний размер элементарной ячейки составлял 1 нм. Начальная намагниченность частиц всех размеров определялась как однородная и направленная по оси Ox, которая также являлась осью легкого намагничивания. Для получения петель гистерезиса внешнее магнитное поле прикладывалось вдоль оси Ox, а проекция его напряженности на Ox изменялась от 500 кА/м до –500 кА/м и обратно с шагом 50 кА/м (40 точек).



Рис. 1. Петли гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов

На рисунке 1 представлены результаты расчетов петель гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов. Для частиц с радиусами 5–12 нм петли имеют одинаковую прямоугольную форму (сплошная линия). Начиная с радиуса 13 нм, вид кривой намагничивания меняется и с увеличением размера частицы принимает форму, характерную для процессов зарождения вихревой магнитной структуры.

Значения *х*-компоненты приведенной остаточной намагниченности ферромагнитных наночастиц железа сферической формы в зависимости от их радиуса приведены на рисунке 2. Для частиц с радиусами от 5 нм до 12 нм значение $(M_r)_x/M_s = 1$. Дальнейшее увеличение размеров частицы приводит к некоторому снижению остаточной намагниченности, а для $r \ge 17$ нм она равна нулю.

Магнитная структура наночастиц радиусами от 5 нм до 12 нм с уменьшением напряженности внешнего поля от 500 кА/м до нуля остается однородной с направлением $\overline{M} \uparrow \uparrow Ox$ (рис. 3). При $(H_{ext})_x = -50$ кА/м все вектора намагниченности когерентно разворачиваются на угол 180° и сохраняют свою ориентацию с дальнейшим увеличением величины напряженности внешнего поля.



Рис. 2. Размерная зависимость величины х-компоненты приведенной остаточной намагниченности сферических ферромагнитных наночастиц железа



Рис. 3. Магнитная структура ферромагнитных наночастиц железа сферической формы радиусами 12, 13 и 20 нм при *H*_{ext} = 0: *а* – в изометрическом изображении; *б* – вид в направлении оси вихря; *в* – в средней плоскости, перпендикулярной оси вихря

При H_{ext} = 0, начиная с r = 13 нм, наблюдается скачкообразный переход от однородной намагниченности к вихревой магнитной структуре (см. рис. 3). При этом ось вихря для частиц с радиусами 13 нм и 14 нм совпадает с осью Ох (начальной намагниченностью и осью легкого намагничивания), а для $r \ge 15$ нм отклоняется от данного направления. Значения координат единичного аксиального вектора й, расположенного вдоль оси вихря, для различных радиусов частиц приведены в таблице. В точках, расположенных на оси вихря, вектор $\vec{M} \uparrow \uparrow \vec{v}$. С отдалением от оси вихря вектор намагниченности поворачивается в плоскости, перпендикулярной расстоянию до этой оси. При этом угол между векторами \vec{M} и \vec{v} монотонно возрастает с увеличением расстояния до оси и достигает своего наибольшего значения α_{max} в точках на поверхности частицы в средней плоскости, перпендикулярной оси вихря. С ростом размера частицы значения α_{max} увеличиваются и для r ≥ 19 нм составляют 90° (см. рис. 3 (в) и табл.).

При уменьшении внешнего поля начальная однородная намагниченность наночастиц с *г* ≥ 13 нм сохраняется до некоторого критического значения напряженности *H*_{nucl}, известного как по-



Таблица — Характеристики вихревой магнитной структуры сферических ферромагнитных наночастиц железа различных радиусов: координаты единичного вектора \vec{v} вдоль оси вихря и угол α_{\max} между векторами \vec{M} и \vec{v} поверхностных точек средней плоскости, перпендикулярной оси вихря, при H_{ext} = 0; значения полей нуклеации H_{nucl} и аннигиляции H_{ann} вихря

<i>r</i> , НМ	v_x	vy	v_z	α_{max} , °	<i>H_{nucl},</i> кА/м	<i>H_{ann},</i> кА/м
13	1,00	0,00	0,00	0	0	50
14	1,00	0,00	0,00	52	50	100
15	0,99	0,12	0,00	63	150	150
16	0,10	0,84	-0,53	67	150	200
17	0,00	0,88	0,47	75	150	250
18	0,00	0,64	-0,76	82	150	300
19	0,00	0,84	-0,54	90	200	300
20	0,00	-0,21	0,98	90	200	300
25	0,00	-0,87	0,50	90	250	400
30	0,00	-0,76	-0,66	90	250	450

ле нуклеации. Дальнейшее постепенное снижение внешнего поля до нуля приводит к зарождению вихревой магнитной структуры и ее развитию, которое сопровождается поворотом оси вихря от $Ox \ \kappa \ \vec{v}$, увеличением угла a_{max} и уменьшением M_x/M_S . При увеличении модуля напряженности внешнего поля, приложенного в противоположном направлении, от нуля до H_{ann} (см. рис. 1) изменение магнитной структуры частицы происходит в обратном порядке. Величина H_{amn} , при которой магнитная структура снова становится однородной в направлении против Ox, называется полем аннигиляции. Значения H_{nucl} и H_{amn} в зависимости от радиуса частиц приведены в таблице.

Заключение

В статье показано, что поведение магнитной структуры ферромагнитных наночастиц железа сферической формы во внешнем магнитном поле зависит от их размера. Частицы с $r \le R_0$ сохраняют состояние однородного намагничивания, а изменение направления намагниченности в переключающем поле на противоположное осуществляется когерентным поворотом. При $r > R_0$ изменение внешнего поля приводит к нарушению однородной намагниченности частицы, возникновению и развитию вихревой магнитной структуры. Наблюдаемый скачкообразный переход от однородной намагниченности к вихревой в отсутствии внешнего поля можно рассматривать как некоторый аналог фазового перехода второго рода с критической точкой r = 13 нм.

Для частиц, размеры которых сопоставимы с шириной доменной стенки и обменной длиной для данного материала, минимизация свободной энергии обеспечивается не разбиением материала на домены (как это имеет место в макрообразцах), а формированием вихревой структуры, уменьшающей собственное магнитное поле частицы в ее окрестности.

Список литературы

- Квасов Н.Т., Пунько А.В., Дорошевич И.Л., Петухов Ю.А., Углов В.В., Чибирай М.С., Асташинский В.М. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – 2. – С. 52–55.
- Ibusuki T., Kojima S., Kitakami O., Shimada Y. // IEEE Transactions on Magnetics. – 2001. – 37, 4. – P. 2223– 2225.
- 3. *Браун У.Ф.* Микромагнетизм. М.: Наука, 1979. 160 с.
- Fischbacher T., Franchin M., Bordignon G., Fangohr H. // IEEE Transactions on Magnetics. – 2007. – 43, 6. – P. 2896–2898.
- 5. Кондорский Е.И. // Известия академии наук СССР, серия физическая. 1952. 16, 4. С. 398–411.

FORMATION OF FERROMAGNETIC NANOSTRUCTURES IN COMPRESSION PLASMA AND THEIR PHYSICAL PROPERTIES

N.T. Kvasov, I.L. Doroshevich

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics P. Brovki Str. 6, 220013 Minsk, Belarus, tel. 293-86-13, e-mail: kvasov@bsuir.by, dorochevich@bsuir.by

Results of research behavior magnetic structure a ferromagnetic spherical nanoparticles iron by the radiuses 5-30 nanometers in an external magnetic field a method of computer modeling are presented. The analysis of hysteresis loops and vortex structure magnetization formation for particles of the various sizes is carried out. The dimensional effect in change of symmetry magnetization – analog of phase transition the second sort is established. Calculations were carried out by means of micromagnetic simulation package Nmag.