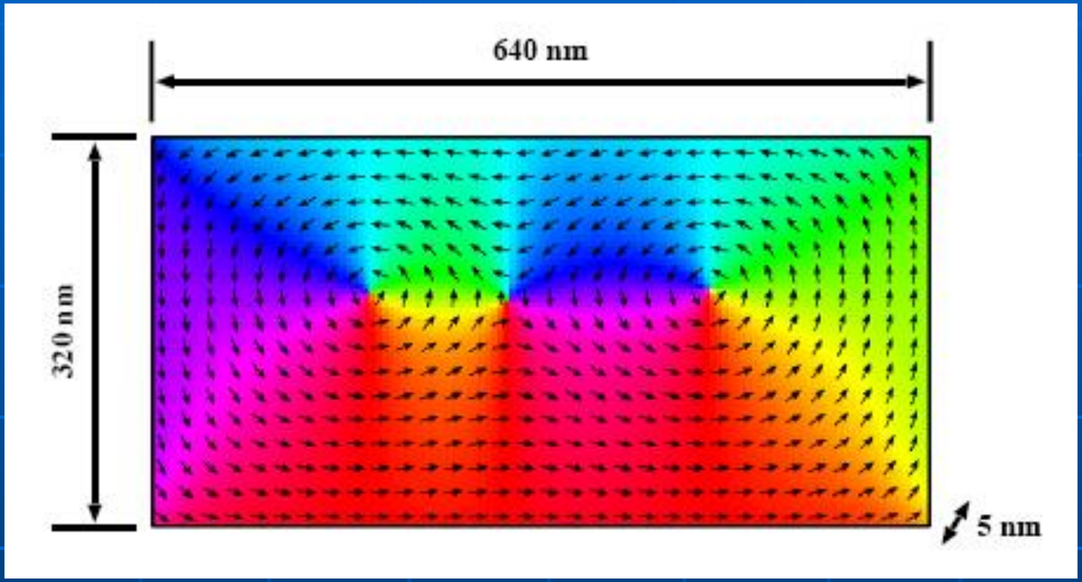
Микромагнитное моделирование: детали алгоритма

О.С. Трушин
Ярославский филиал ФТИАН

План

- Введение (зачем это нужно)
- Описание модели
- Вывод формул магнитостатики
- Дискретизация модели
- Компьютерный алгоритм
- Известные пакеты программ
- Примеры микромагнитных расчетов
- Выводы

Микромагнитная модель



Моделирование поведения магнитных материалов в микромасштабе (нм – мкм)

История развития

- Ландау-Лифшиц 1935 г. (идея функционала намагниченности)
- William F. Brown 1963 (основные компоненты модели)
- Компьютерная реализация 1980-наши дни

Основная концепция

Магнетик – сплошная среда, в каждой точке которой задан вектор намагниченности

$$\vec{M} = M_s \cdot \vec{m}(x,y,z)$$

Намагниченнсти насышения принимается одинаковой во всех точках. Тогда ориентация вектора намагниченности определяется единичным вектором.

$$\vec{m} = \frac{\vec{M}}{M_s}.$$

Полная энергия магнетика

$$E_{tot} = E_{exc} + E_{anis} + E_{ext} + E_{mstat}$$

Обменное взаимодействие

$$E_{exc} = \int_V \frac{A}{M_s^2}\left(\left|\nabla M_x\right|^2 + \left|\nabla M_y\right|^2 + \left|\nabla M_z\right|^2\right) d^3 r.$$

Ответственна за ферромагнитное упорядочение спинов.
Она возрастает при разрушении спинового упорядочения.

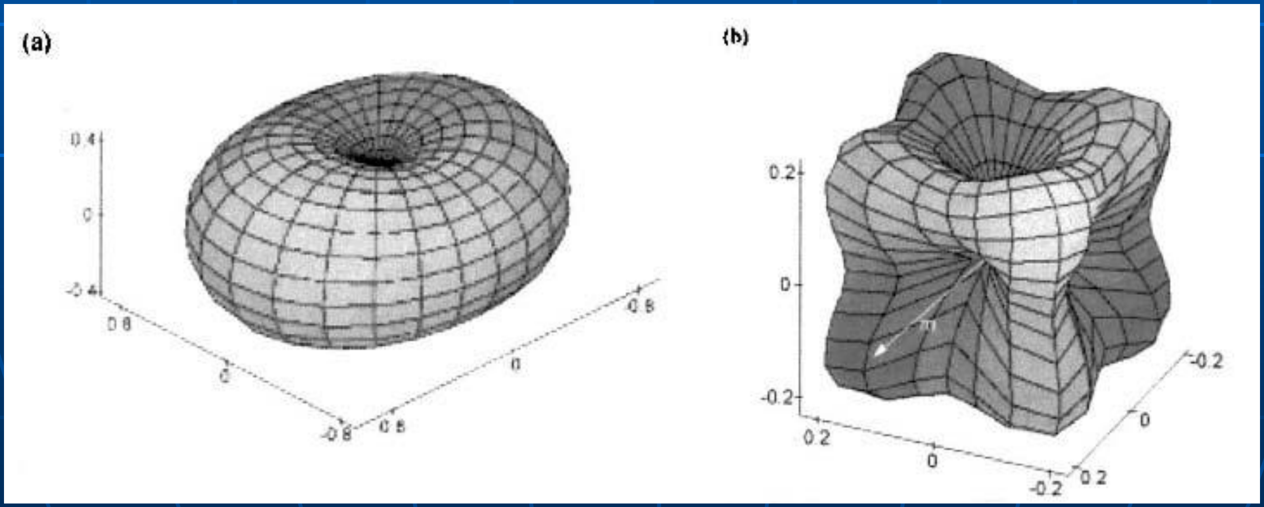
Для пермалоя (Ni-Fe) A=1.05e-11 J/m

Магнитная анизотропия

$$\vec{E}_{anis} = \int\limits_V K \sin^2 \phi \, d^3 r,$$

Для одноосной анизотропии

Обусловлена анизотропией кристаллической решетки магнетика и ответственна за наличие легких и трудных осей намагничивания



Энергетическая поверхности для а) одноосной анизотропии, б) кубической анизотропии

Взаимодействие с внешним полем

$$E_{ext} = -\int_V \mu_0 \vec{M}\, \vec{H}_{ext} d^3 r.$$

обусловлена взаимодействием вектора намагниченности с внешним полем и возрастает с увеличением угла между этими векторами.

Магнитостатическое взаимодействие

$$E_{mstat} = \int_V \frac{\mu_0}{2} \vec{M}(r) \cdot \vec{H}_d \, d^3 r.$$

$$E_{mstat} = \int_V \frac{\mu_0}{8\pi} \vec{M}(r) \cdot \left[\int_V \nabla \vec{M}(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|^3} d^3 r' - \int_S \vec{n} \cdot \vec{M}(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|^3} d^2 r' \right] d^3 r.$$

обусловлена классическим (максвелловским) дальнодействующим взаимодействием магнитных моментов.
Это взаимодействие ответственно за образование магнитных вихрей

Вывод выражений для магнитостатической энергии

$\vec{H} \equiv \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$ $\quad div\vec{B} = 0 \quad \Rightarrow \quad div\vec{H} = -div\vec{M}$

$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{H}_d$ $\quad div\vec{H}_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad div\vec{H}_d = -div\vec{M}$

$rot\vec{H} = \vec{j}$ $\quad rot\vec{H}_0 = \vec{j} \quad \Rightarrow \quad rot\vec{H}_d = 0$

$\Downarrow$

$\rho_M = -div\vec{M}$ $\quad \vec{H}_d = \vec{\nabla}\psi_d$

$\Downarrow$

$$\Delta\psi_d = \rho_M$$

Решение уравнения Пуассона

$$\Delta \psi_d = \rho_M$$

Метод функций Грина

$$\Delta \psi_G = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_G = \frac{1}{r}$$

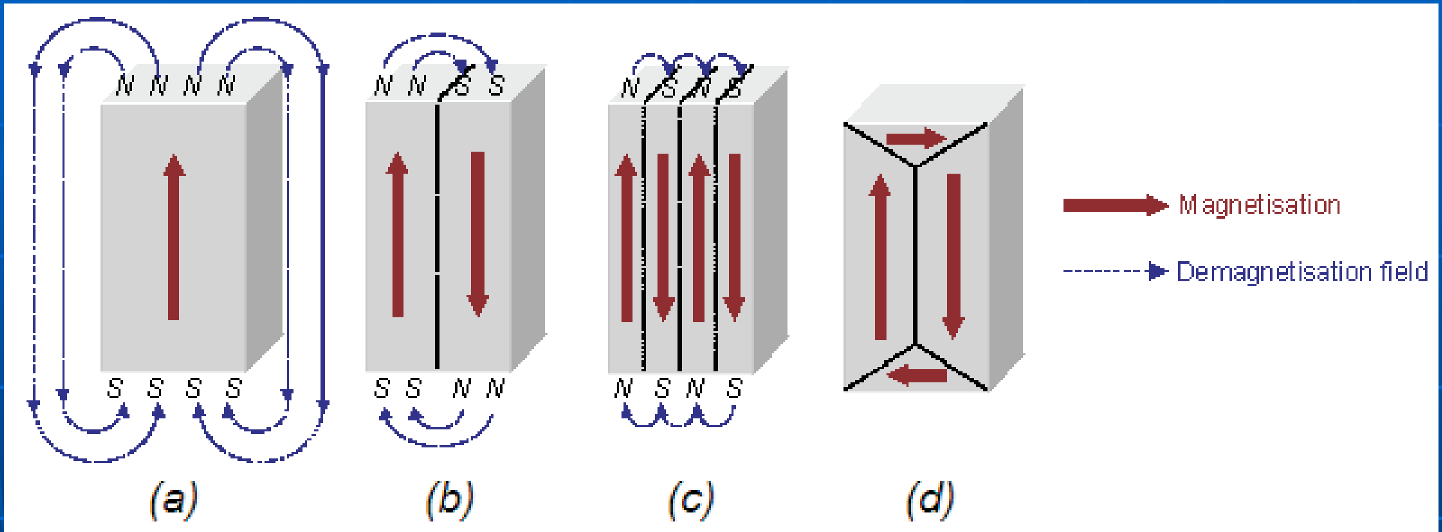
$$\psi_d = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho_M(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} dV$$

$$\vec{H}_d = \frac{1}{4\pi} \left[\int_V \rho_M \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}\,'}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|^3} dV + \int_S \sigma_M \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}\,'}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|^3} dS \right]$$

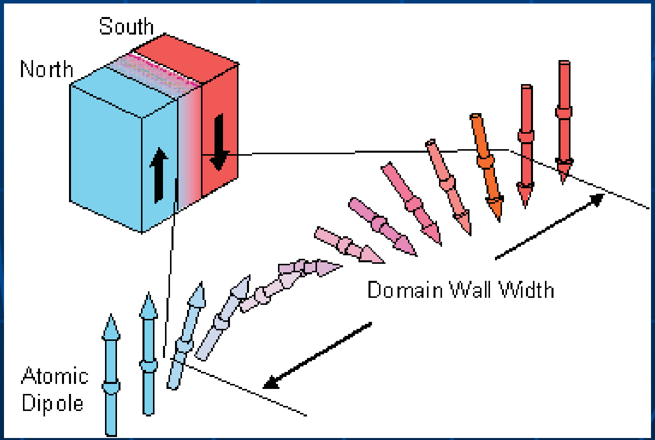
$$\rho_M = -div\vec{M}$$

$$\sigma_M = \vec{n} \cdot \vec{M}$$

Минимизация магнитостатической энергии путем замыкания потока

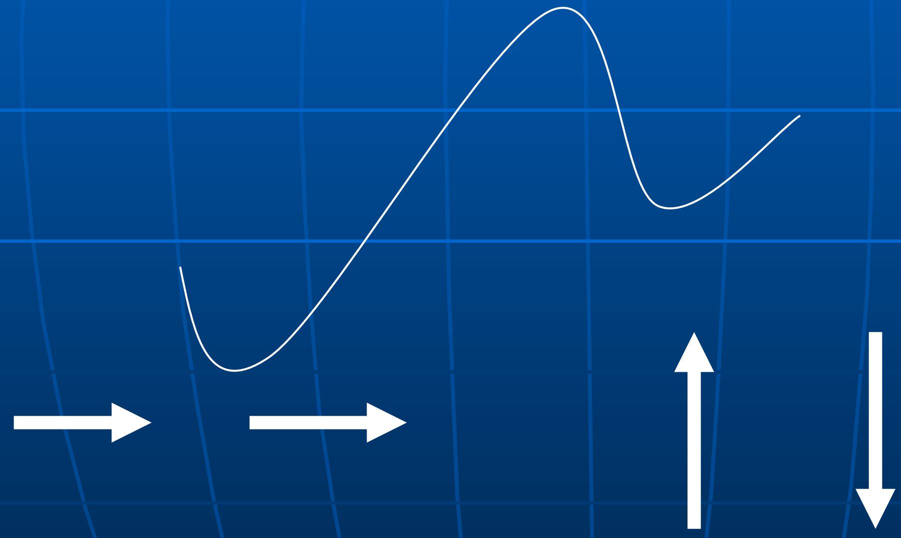


Формирование
Доменных стенок

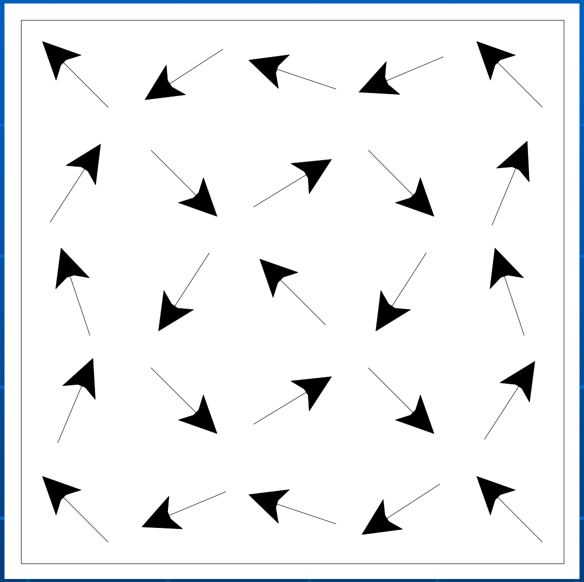


Простая модель: система магнитных диполей

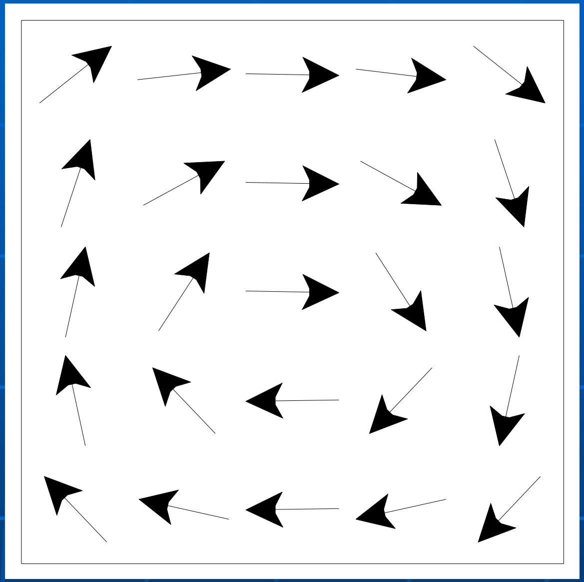
$$E_{ij} = -\frac{\mu_0}{4\pi \cdot r_{ij}^{\;3}}\left(3\left(\vec{M}_i \cdot \vec{e}_{ij}\right)\left(\vec{M}_j \cdot \vec{e}_{ij}\right) - \vec{M}_i \cdot \vec{M}_j\right)$$



Локальные минимумы энергии: пример расчета в OOMMF

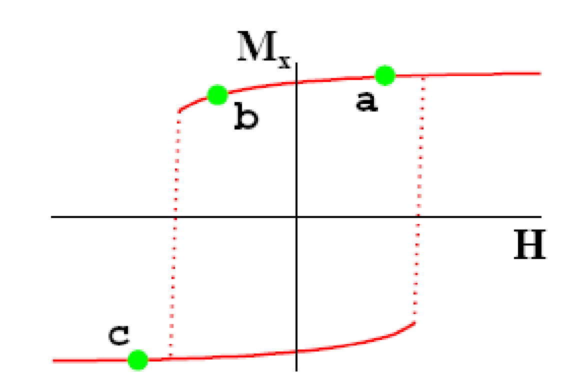


E=17096 J/m3



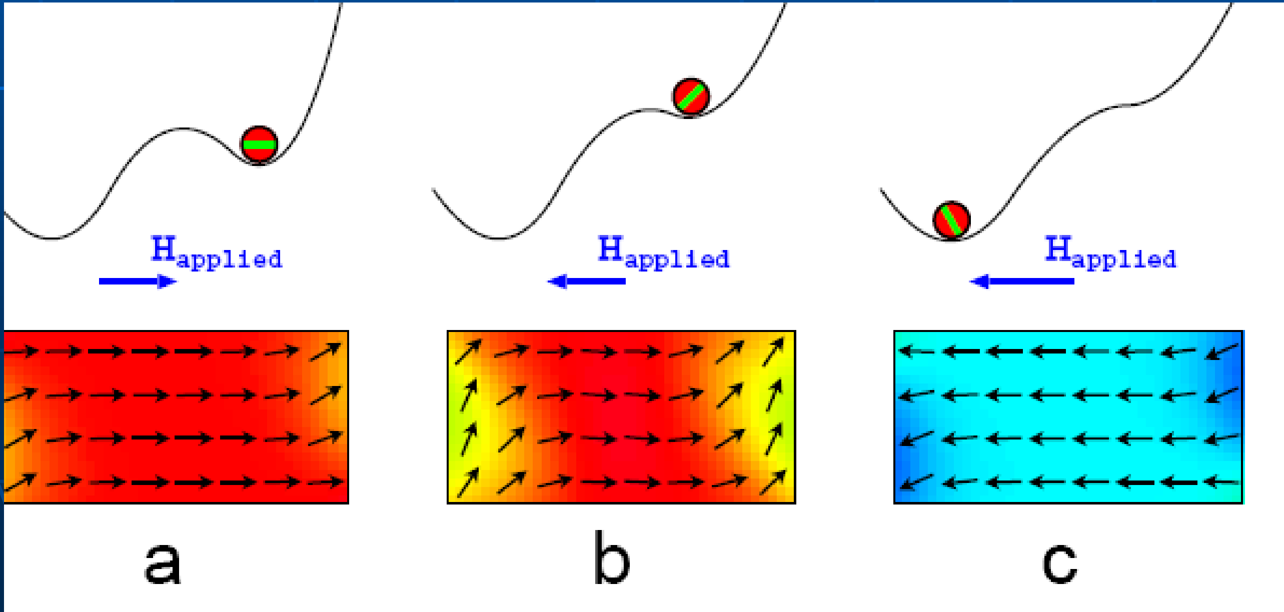
E=15708 J/m3

Решение статической задачи



$$\mathrm{H_{eff}} = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial E}{\partial \mathrm{M}}$$

$$\vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0$$

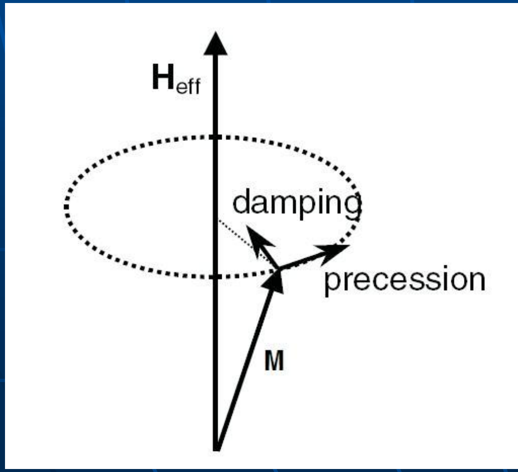


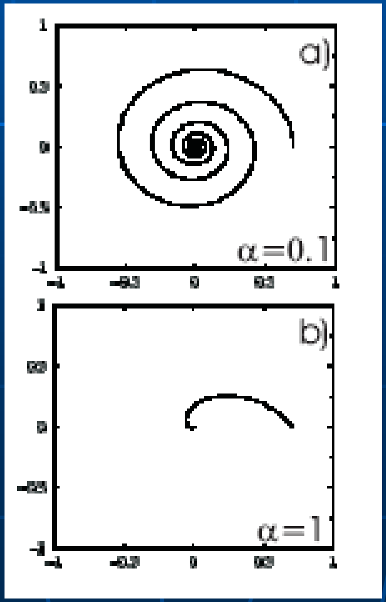
Решение динамической задачи

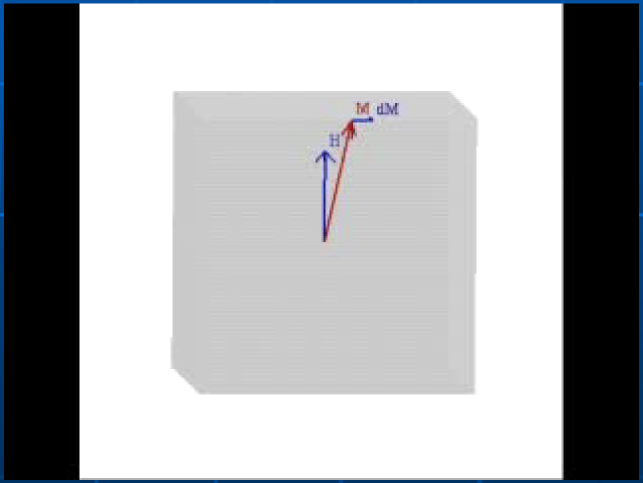
Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{-\omega}{1+\lambda^2}\mathbf{M}\times\mathbf{H}_{\mathrm{eff}} - \frac{\lambda\omega}{(1+\lambda^2)M_{\mathrm{s}}}\mathbf{M}\times(\mathbf{M}\times\mathbf{H}_{\mathrm{eff}})$$

где $$\mathbf{H}_{\mathrm{eff}} = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}}$$

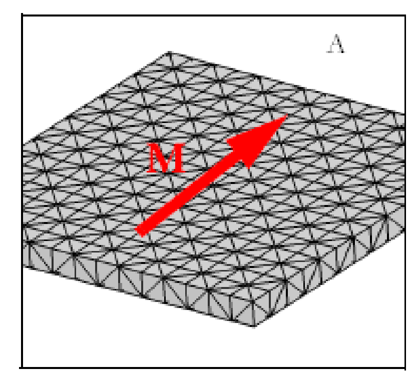






Пространственная дискретизация

$$\int \rightarrow \sum$$



$$\delta_0 = \sqrt{A/K}$$

Типичные масштабы задачи

параметр доменной стенки
(от 1 нм до 100 нм в магнитомягких)

$$l_{ex} = \sqrt{A/\mu_0 M_s^{\,2}}$$

обменная длина
– толщина, на которой обменное взаимодействие доминирует (~ 2 нм)

Определяет толщину пленки ниже которой выгоднее стенки Блоха, чем Нееля

Типичный размер сетки
2x2x2 nm3

Численная модель

$$E_Z = -\mu_0 \sum_{i,j,k=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\dots} \mathbf{H_a}\big|_{i,j,k} \cdot \mathbf{M}_{i,j,k} \delta V$$

$$E_x = 2A \sum_{i,j,k=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\dots} \left(\frac{1-\mathbf{m}_{i,j,k}\cdot\mathbf{m}_{i+1,j,k}}{\delta x^2} + \frac{1-\mathbf{m}_{i,j,k}\cdot\mathbf{m}_{i,j+1,k}}{\delta y^2} + \frac{1-\mathbf{m}_{i,j,k}\cdot\mathbf{m}_{i,j,k+1}}{\delta z^2} \right) \delta V$$

$$E_k = K \sum_{i,j,k} |\mathbf{m}_{i,j,k} \times \mathbf{k}|^2 dV \equiv K \sum_{i,j,k} [1 - (\mathbf{m}_{i,j,k} \cdot \mathbf{k})^2] \delta V$$

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i,j,k=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\dots} \mathbf{H_d}_{i,j,k} \cdot \mathbf{M}_{i,j,k} \delta V$$

Численое решение уравнений Ландау-Лифшица-Гильберта

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\vec{m}\times\vec{h} - \alpha\vec{m}\times\left(\vec{m}\times\vec{h}\right)$$

$$\frac{\Delta\vec{m}}{\Delta t} = -\vec{m}\times\vec{h} - \alpha\vec{m}\times\left(\vec{m}\times\vec{h}\right)$$

$$\vec{m}^{t+\Delta t} = \vec{m}^{t} + \Delta t\frac{d\vec{m}}{dt}$$

Алгоритм

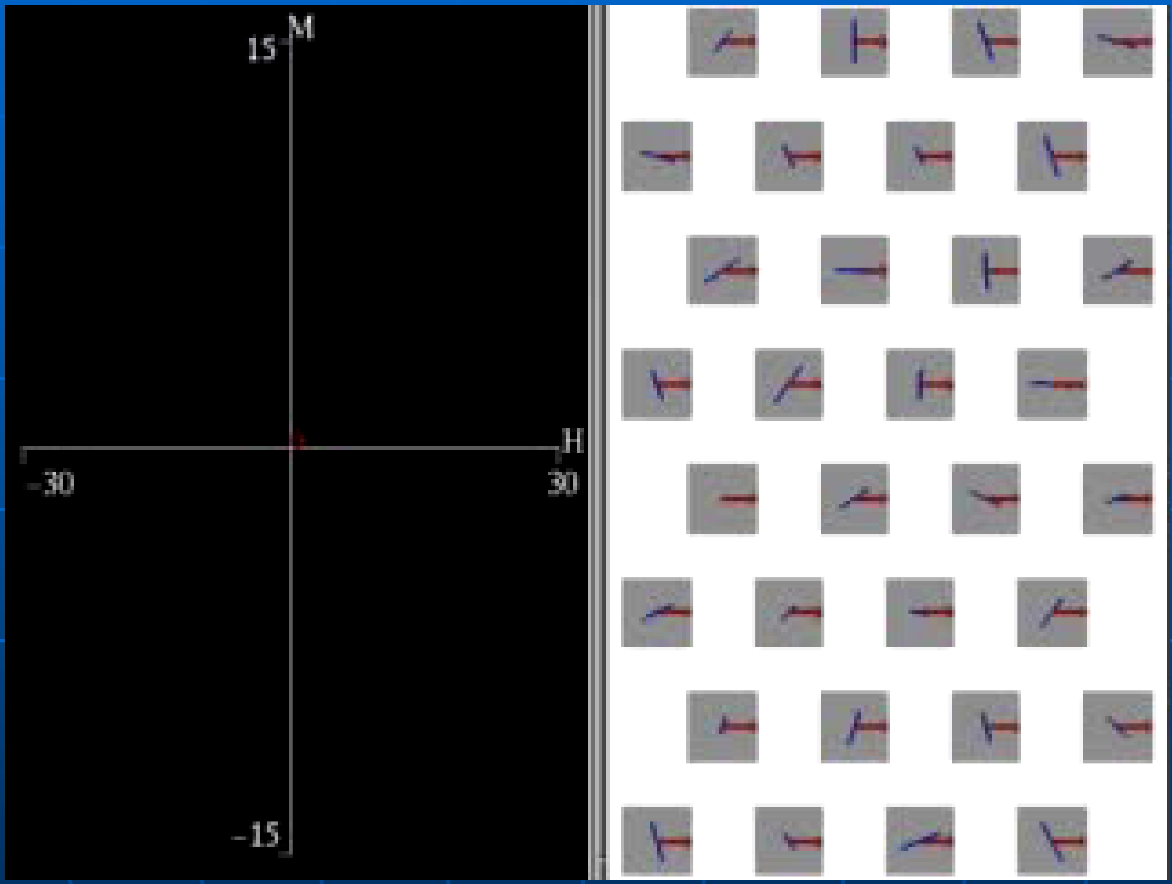
- Вычисляем обменное поле
- Вычисляем поле анизотропии
- Вычисляем магнитостатическое поле
- Вычисляем эффективное поле
- Интегрируем уравнение ЛЛГ
- Процедура повторяется пока намагниченность не стабилизируется

$dm/dt < 10-9$

Известные пакеты микромагнитного моделирования

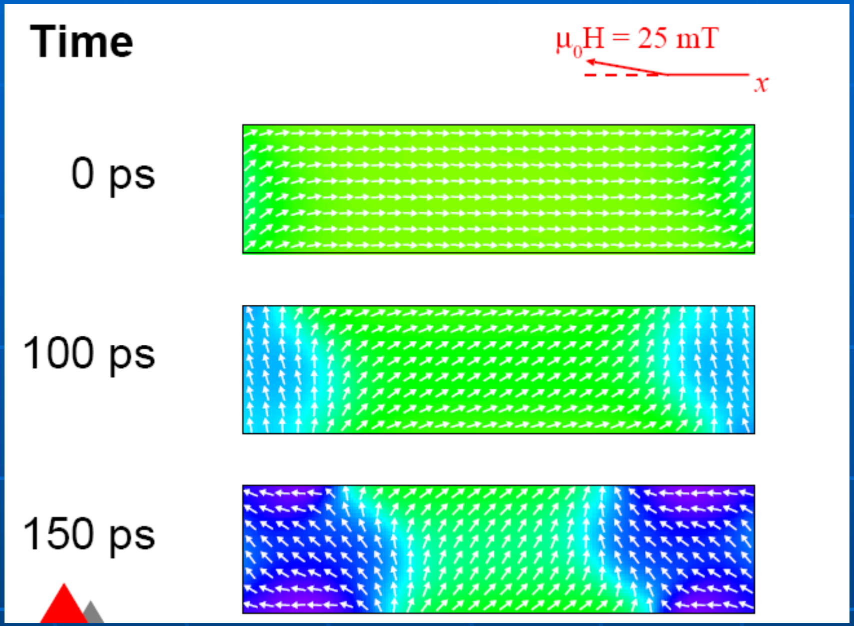
- LLG – коммерческий
- MagOasis – коммерческий
- MAGPAR – свободно распространяемый
- SimulMag – свободно распространяемый
- OOMMF – свободно распространяемый

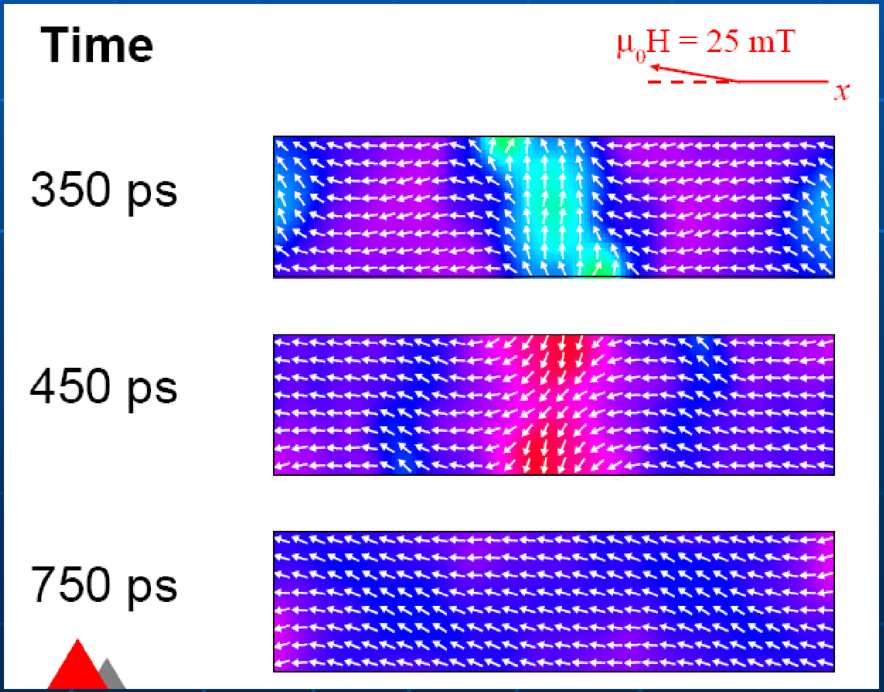
Пример: ансамбль FePt частиц



Hysteresis loop in self-assembled FePt nanoparticle array. Movie shows 32 spherical 4 nm particles (though displayed as squares) separated by 6 nm (center-to-center) in hexagonal array, HK=15 kOe, M vectors in red, easy axes in blue, traces hysteresis loop on MH graph

Динамика процесса перемагничивания



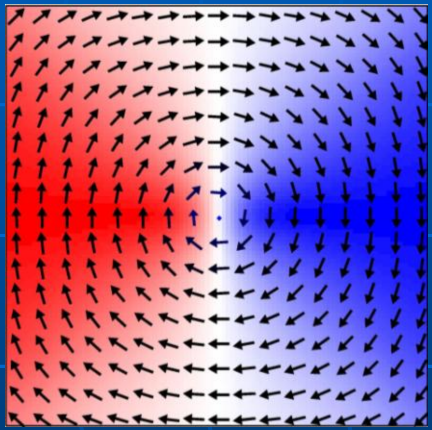


Зависимость доменной структуры от размеров наноструктуры

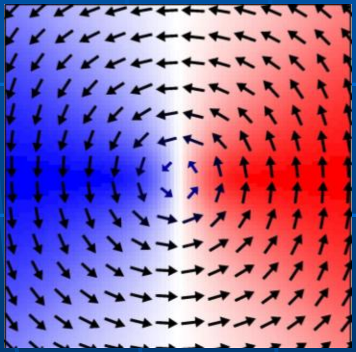
Поиск минимума полной энергии при отсутствии внешнего поля

L=W (30-1000 nm); H=10nm, шаг сетки 2 нм

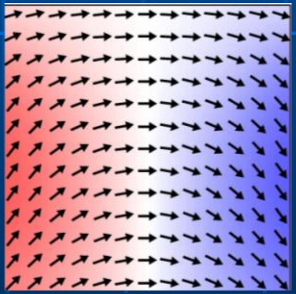
100 нм



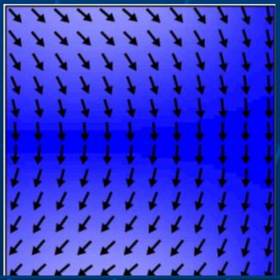
80 нм



77 нм



70 нм



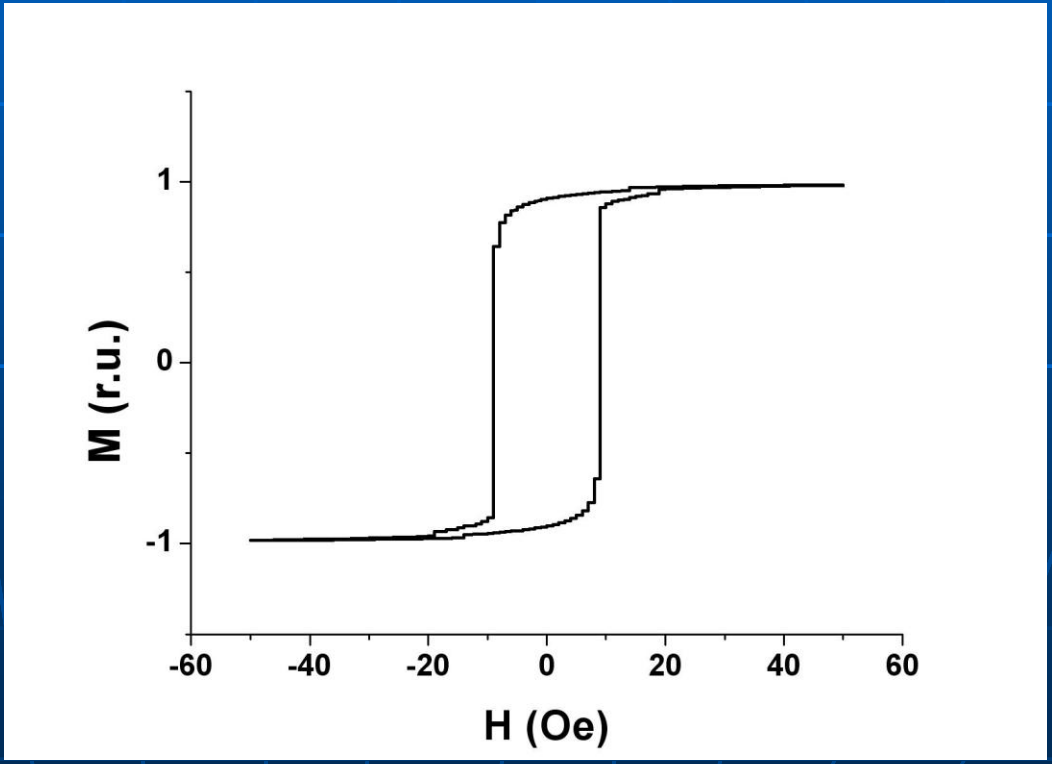
50 нм

Моделирование процесса перемагничивания

Минимизация полной энергии при фиксированном значении внешнего магнитного поля (поле в плоскости)

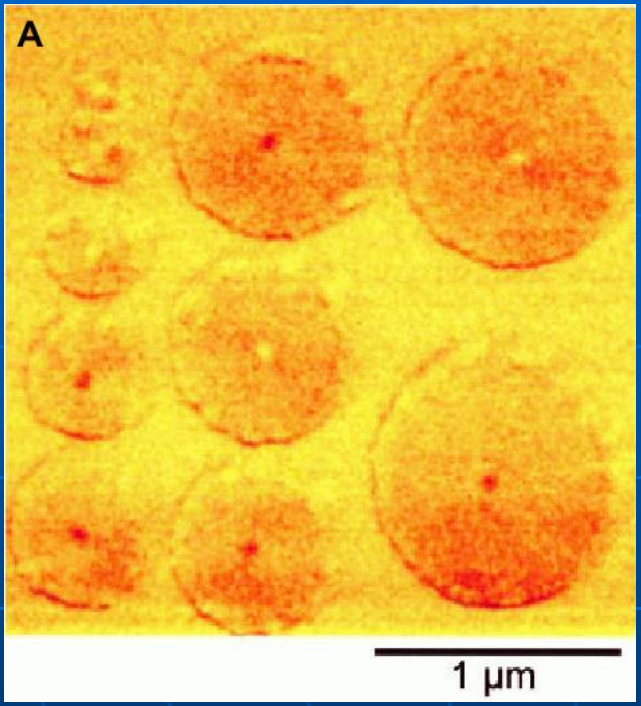
W=1 мкм
L=3 мкм

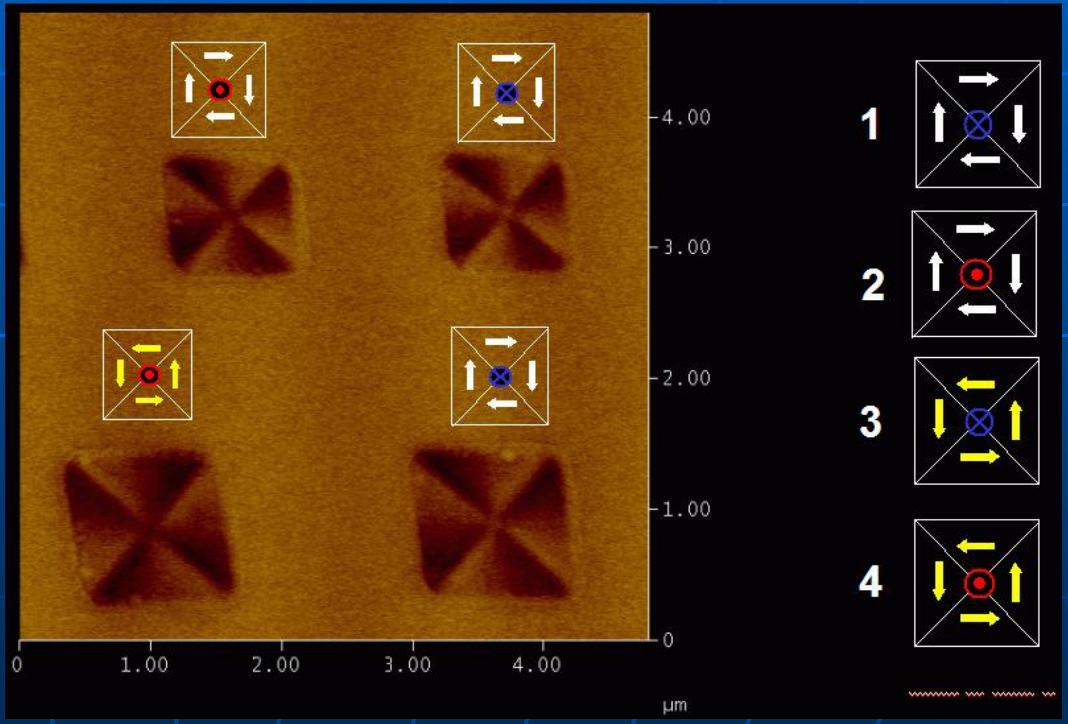
Сетка 10 нм



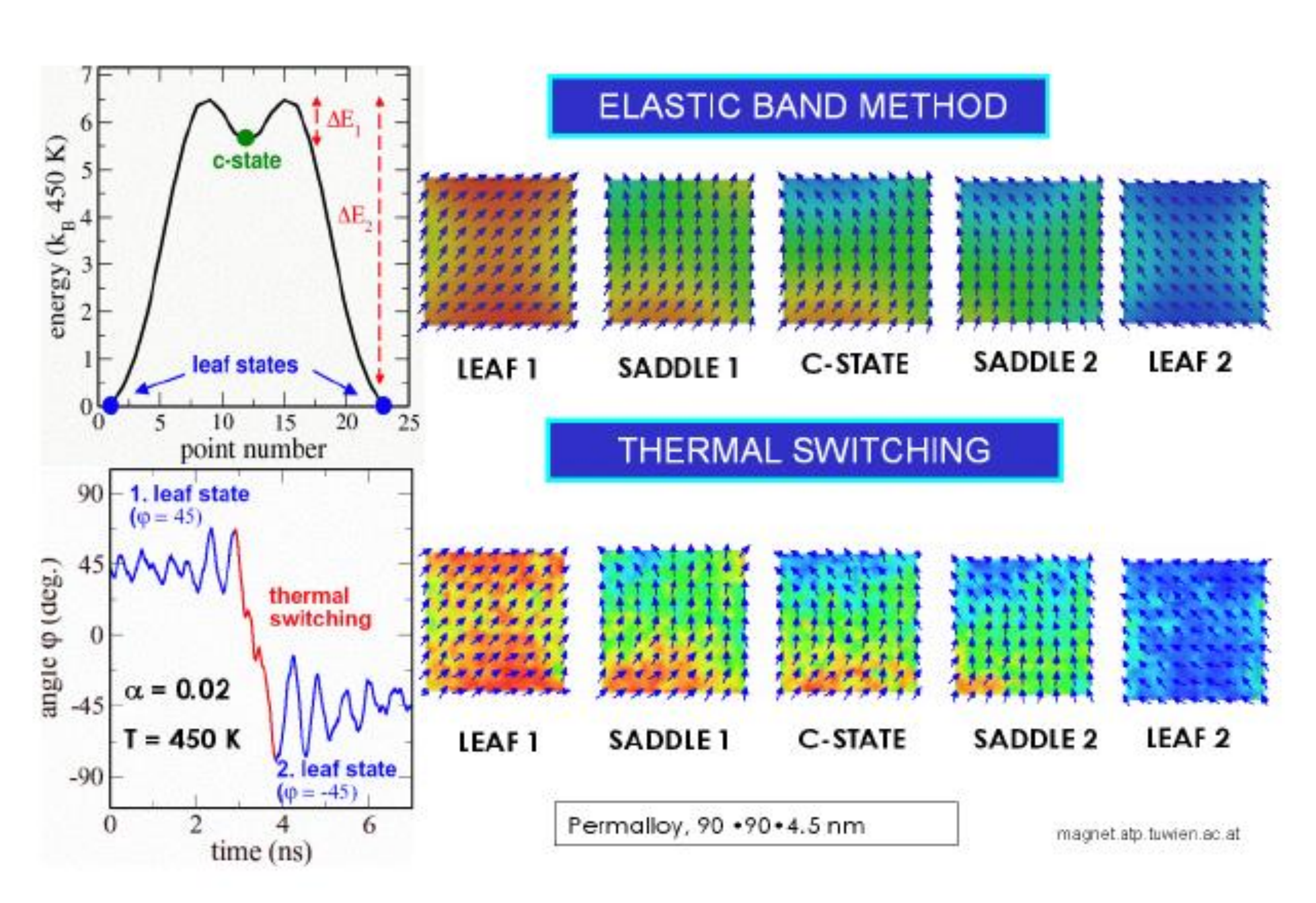
Пример петли гистерезиса для Н=30 нм

Примеры экспериментальных наблюдений





Оценка энергетических барьеров для перемагничивания



Проблемы микромагнитной модели

- Зависимость результатов от размера сетки
- Парадокс Брауна (учет дефектов)
- Ограничены размеры образцов
- Температура явным образом не учитывается

Литература

- Attila Kokay Numerical investigations of micromagnetic structures, PhD thesis, Hungarian Academy of Science,2005
- He Zhang A NUMERICAL STUDY OF DYNAMIC MICROMAGNETICS, MS thesis, 2006, University of New Orleans
- **Josef Fidler and Thomas Schrefl Micromagnetic modelling—the current state of the art,** J. Phys. D: Appl. Phys. **33** (2000) R135–R156.
- Amikam Aharoni Micromagnetics: past, present and future, Physica B 306 (2001) 1–9
- http://math.nist.gov/oommf
- http://www.ctcms.nist.gov/˜rdm/mumag.org.html