

МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

Р.А. Михайлюк, И.Л. Дорошевич

Аннотация. В статье представлены результаты расчета магнитного момента наночастиц железа сферической формы, которые проводились с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag.

Ключевые слова: наночастица, микромагнитное моделирование, магнитный момент.

MAGNETIC MOMENT OF SPHERICAL IRON NANOPARTICLES

R.A. Mihaylyuk, I.L. Doroshevich

Abstract. The article presents the results of calculating the magnetic moment of spherical iron nanoparticles, which was carried out using the Nmag software package for micromagnetic modeling.

Keywords: nanoparticles, micromagnetic modeling, magnetic magnetic.

Магнитные наночастицы – одни из самых интересных и активно изучаемых в настоящее время объектов [1], поскольку их уникальные магнитные свойства являются основанием для широкого спектра их практического использования: создание нового поколения изделий микро- и наноэлектроники, устройств для записи и хранения информации сверхвысокой плотности, применение в медицине и бионанотехнологии для направленной доставки лекарств, магниторезонансной томографии, локальной гипертермии и т. д.

Расчет магнитного момента наночастиц железа сферической формы проводился на основе результатов, полученных с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag [2], алгоритм расчета которого основан на численном решении уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта. Данные результатов моделирования извлекались в текстовые файлы *plot.dat*, *_dat.ndt* и **.vtk* файлы. Визуализация векторных полей проводилась просмотром данных **.vtk* файлов в программе MayaVi.

Ранее сообщалось [3] о формировании вихревой магнитной структуры в сферических наночастицах железа с радиусами $R \geq 13$ нм. Характер распределения вектора намагниченности \vec{M} в таких частицах обуславливает наличие у них отличного от нуля магнитного момента \vec{p} , направленного вдоль оси вихря:

$$\vec{p} = \int_{(V)} \vec{M} dV,$$

где V – объем частицы.

В силу симметричного распределения вектора \vec{M} относительно оси вихря величина магнитного момента частицы равна

$$p = \int_{(V)} M_v dV, \quad (1)$$

где M_v – проекция вектора намагниченности на ось вихря.

Модуль магнитного момента p частицы радиусом R можно выразить через усредненные по ее объему значения проекций вектора намагниченности $\langle M_x \rangle$, $\langle M_y \rangle$ и $\langle M_z \rangle$, содержащиеся в файлах данных *_dat.ndt*:

$$p = \frac{4}{3} \pi R^3 \sqrt{\langle M_x \rangle^2 + \langle M_y \rangle^2 + \langle M_z \rangle^2}. \quad (2)$$

В случае однородно намагниченной до насыщения наночастицы радиусом R , ее магнитный момент \vec{p}_{unif} можно вычислить как

$$\vec{p}_{unif} = \frac{4\pi}{3} R^3 M_s \vec{m}. \quad (3)$$

На Рисунке 1 представлены результаты расчета величины магнитного момента наночастиц железа различных радиусов при напряженности внешнего магнитного поля $H_{ext} = 0$. Видно, что зависимость магнитного момента частиц от их радиуса в области значений $5 \text{ нм} \leq R \leq 12 \text{ нм}$, соответствующей состоянию частиц с однородной намагниченностью, описывается согласно (3) кубической функцией, а на участках $13 \text{ нм} \leq R \leq 15 \text{ нм}$ и $16 \text{ нм} \leq R \leq 30 \text{ нм}$, соответствующих состоянию с вихревой магнитной структурой, хорошо аппроксимируется линейными функциями:

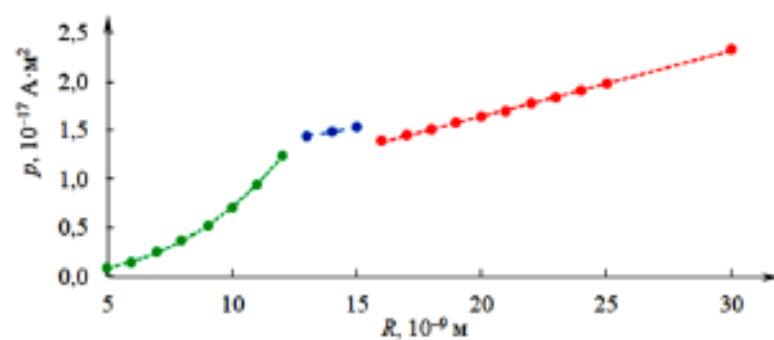


Рис. 1 – Размерная зависимость величины магнитного момента p сферических наночастиц железа при $H_{ext} = 0$

$$p(R) = \begin{cases} 7 \cdot 10^6 \cdot R^3 \text{ (A} \cdot \text{m}^2\text{)} & \text{при } 5 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 12 \cdot 10^{-9} \text{ м,} \\ 4,24 \cdot 10^{-10} \cdot R + 8,91 \cdot 10^{-18} \text{ (A} \cdot \text{m}^2\text{)} & \text{при } 13 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 15 \cdot 10^{-9} \text{ м,} \\ 6,76 \cdot 10^{-10} \cdot R + 2,97 \cdot 10^{-18} \text{ (A} \cdot \text{m}^2\text{)} & \text{при } 16 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 30 \cdot 10^{-9} \text{ м.} \end{cases}$$

На Рисунке 2 приведены результаты вычислений величины приведенного магнитного момента $p/p_{uniform}$ и магнитного момента p_a в расчете на один атом для частиц различных радиусов при $H_{ext} = 0$. Расчет показал, что $p/p_{uniform}$ и p_a частиц с $R = 13-30$ нм с увеличением их размера уменьшаются. Это связано с тем, что с увеличением радиуса частицы углы α между векторами намагниченности отдельных точек и осью вихря (направление которой задается единичным вектором \vec{V}_0) возрастают, что в свою очередь приводит к уменьшению проекций векторов \vec{M} на направление \vec{V}_0 . На Рисунке 2 выделяется 3 участка: при $5 \text{ нм} \leq R \leq 12 \text{ нм}$ значения $p/p_{uniform} = 1$ и $p_a = 2,16 \mu_B$, при $12 \text{ нм} \leq R \leq 16 \text{ нм}$ приведенный магнитный момент и магнитный момент в расчете на атом достаточно резко падают, а для $R \geq 16 \text{ нм}$ их уменьшение становится более плавным.

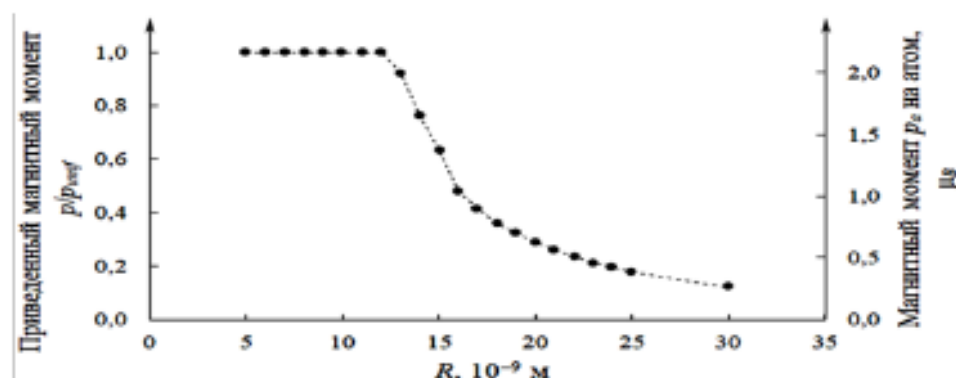


Рис. 2 – Размерная зависимость величины приведенного магнитного момента $p/p_{uniform}$ и магнитного момента p_a в расчете на один атом для сферических наночастиц железа при $H_{ext} = 0$

Анализ векторных полей намагниченности, наблюдаемых в программе MayaVi, позволяет сделать вывод, что для частиц радиусами 13 нм и 14 нм зависимость угла α от расстояния до оси вихря близка к линейной (Рис. 3). В данном случае в сферической системе координат проекция вектора намагниченности на ось вихря может быть представлена в виде

$$M_v = M_s \cos\left(\frac{\alpha_{max}}{R} r \sin \theta\right), \quad (4)$$

где α_{max} – угол между \vec{M} и осью вихря в точках на поверхности частицы в средней плоскости, перпендикулярной оси вихря; r – расстояние от центра частицы, θ – зенитный угол сферической системы координат, отсчитанный от оси вихря.

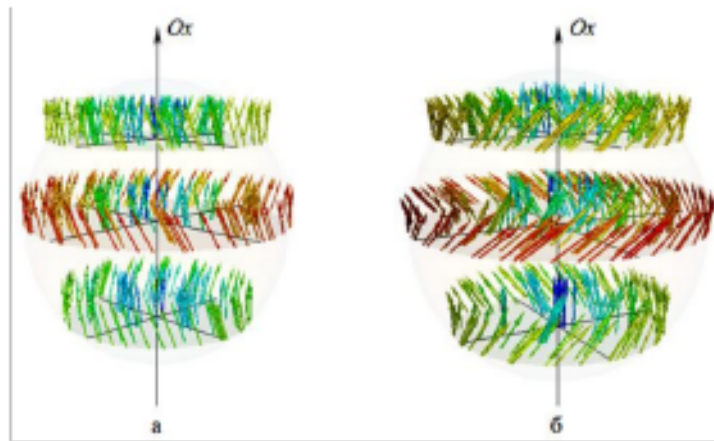


Рис. 3 – Распределение вектора намагниченности в перпендикулярных осях вихря плоскостях сферических наночастиц железа при $H_{ext} = 0$. Цвет стрелок не связан с величинами векторов

Подставляя (4) в формулу (1), получаем следующее выражение для величины магнитного момента p частицы радиусом R в сферической системе координат

$$p = 2\pi M_S \int_0^R \int_0^\pi \cos\left(\frac{\alpha_{max}}{R} r \sin \theta\right) r^2 \sin \theta dr d\theta. \quad (5)$$

В результате расчета магнитного момента по формуле (5) были получены следующие значения: $p = 1,44 \cdot 10^{-17} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ для частиц с $R = 13 \text{ нм}$ и $p = 1,48 \cdot 10^{-17} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ для частиц с $R = 14 \text{ нм}$. Относительное отклонение данных значений от результатов вычислений магнитного момента по формуле (2) составило соответственно 2,6 % и 10 %, что свидетельствует об удовлетворительной корректности (точности) предложенного выражения (5) в качестве аналитической аппроксимации величины магнитного момента сферических наночастиц железа радиусами 13 нм и 14 нм.

Эволюцию вихревой магнитной структуры сферических наночастиц железа во внешнем поле можно проследить по зависимости их магнитного момента от напряженности внешнего поля, представленной на Рисунке 4.

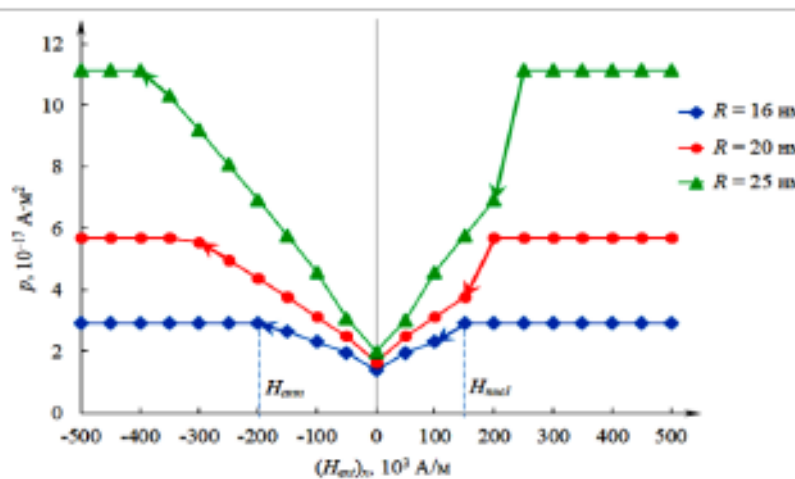


Рис. 4 – Зависимость величины магнитного момента сферических наночастиц железа различных радиусов от напряженности внешнего поля

Видно, что процесс образования вихревой структуры (от зарождения при поле нуклеации H_{nuc} [2] до установления при $H_{ext} = 0$) менее «продолжителен» по сравнению с ее разрушением (от $H_{ext} = 0$ до поля аннигиляции H_{ann}), т. е. переходом к состоянию с однородной намагниченностью. Таким образом, можно сделать вывод, что состояние с вихревой магнитной структурой сферической наночастицы железа с $R > 15 \text{ нм}$ при $H_{ext} = 0$ является устойчивым равновесием.

Список использованных источников:

1. Горовенко Л.А. Математические методы компьютерного моделирования физических процессов // Международный журнал экспериментального образования. Пенза: ИД «Академия естествознания», 2017. – № 2. – с. 92–93.
2. A Systematic Approach to Multiphysics Extensions of Finite-Element-Based Micromagnetic Simulations: Nmag / T. Fischbacher [et al.] // IEEE Transactions on Magnetics. – 2007. – Vol. 43, № 6. – P. 2896–2898.
3. Михайлюк Р.А. Вихревая магнитная структура сферических наночастиц железа / Р.А. Михайлюк, И.Л. Дорошевич // Прикладные вопросы точных наук : материалы V Междунар. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов, преподавателей (АМТИ, г. Армавир, Россия, 30–31 октября 2021 г.) / отв. ред. Л.А. Горовенко ; техн. ред. Е.В. Коврига. – Армавир : РИО АГПУ, 2021. – С. 159–162.