# Микромагнитное моделирование поведения локальной намагниченности в инвертированных опалоподобных структурах

<u>И. С. Дубицкий</u>, А. В. Сыромятников, Н. А. Григорьева, А. А. Мистонов, И. С. Шишкин, С. В. Григорьев



Санкт-Петербургский государственный университет, Физический факультет, кафедра Ядерно-физических методов исследования



Петербургский институт ядерной физики

E-mail: i.dubitsky@phys.spbu.ru

## Синтез ИОПС



1) Коллоидный кристалл был синтезирован методом вертикального осаждения микросфер (средний диаметр микросфер - 500 nm) [1]

2) Пустоты в коллоидном кристалле заполнялись никелем или кобальтом методом электрокристаллизации [2]

3) Микросферы были растворены в толуоле



ИОПС обладают ГЦК структурой [3]

- [1] Napolskii, et. al., Langmuir, **26**(4), 2346-2351, (2009)
- [2] Sapoletova, et. al., Phys. Chem. Chem. Phys., 12(47), 15414-15422, (2010)
- [3] Chumakova, Phys. Rev. B, 90(14), 144103, (2014).

## Элементарная ячейка ИОПС



ГЦК структура

Осаждение никеля или кобальта в пустоты коллоидного кристалла Растворение микросфер

# Структура элементарной ячейки ИОПС

В ГЦК структуре представлены два типа пустот: октаэдрические + контакт (ножка) + тетраэдрические



Примитивная ячейка

1. Ножки соединяют участки тетрадрической и откаэдрической формы



2. Каждая тетраэдрическая область (квазитетраэдр) имеет 4 ножки



## Степень спекания и вид элементарной ячейки ИОПС

Степень спекания (деформации микросфер коллоидного кристалла): k-1 k = r'/rr' - радиус микросферы, r - половина расстояния между центрами микросфер



Основные приближения

- 1. Приближение непрерывной среды, в каждой точке которой определен вектор  $\mathbf{M}(\mathbf{r}) |\mathbf{M}(\mathbf{r})| = M_s(T)$
- 2. Любой параметр длины в модели должен быть много больше постоянной решетки ферромагнетика.
- 3. Не учитываются температурные флуктуации.

$$F = F_{\text{ex}} + F_{\text{an}} + F_{\text{m}} + F_{\text{ext}} = \int_{V} \left\{ A \left[ \left( \nabla m_{x} \right)^{2} + \left( \nabla m_{y} \right)^{2} + \left( \nabla m_{z} \right)^{2} \right] + f_{\text{an}} - 1/2 \mu_{0} M_{S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{\text{m}} - \mu_{0} M_{S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} \right\} dV \qquad \mathbf{m} = \mathbf{M} / \mathbf{M}_{S}$$

$$\text{rot} \left( \mathbf{H}_{m} \right) = 0 \Rightarrow \mathbf{H}_{m} = -\nabla U \qquad \begin{cases} \Delta U_{\text{in}} = \operatorname{div}(\mathbf{M}) \\ \Delta U_{\text{out}} = 0 \\ U_{\text{in}} = U_{\text{out}} \\ \partial U_{\text{in}} / \partial \mathbf{n} - \partial U_{\text{out}} / \partial \mathbf{n} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{n} \end{cases} \operatorname{div}(\mathbf{M}) - \operatorname{nnothoctb} \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{Max} \mathbf{H}_{\text{ext}} \\ \operatorname{Max} \mathbf{H}_{m} \\ \operatorname{Max} \\ \operatorname{Max} \mathbf{H}_{m} \\ \operatorname{Max} \\ \operatorname{$$

Уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ) – уравнение движения намагниченности:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}$$
$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{2}{\mu_0 M_s} \nabla \cdot (A \nabla \mathbf{m}) - \frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial f_{\text{an}}}{\partial \mathbf{m}} + \mathbf{H}_{\text{m}} + \mathbf{H}_{\text{ext}}$$

#### Микромагнитное моделирование ИОПС

- Период ИОПС составляет 700 nm; данные МУРН [4] указывают на периодичность магнитной структуры ИОПС вдали от точки коэрцитивной силы paccматривалась одна элементарная ячейка.
- Образцы представляют собой поликристаллы [5] → магнитокристаллическая анизотропия не учитывалась.
- Форма элементарной ячейки ИОПС определяется микросферами для решения уравнения ЛЛГ был выбран метод конечных элементов, реализованный в пакете Nmag [6]
- Параметры материалов: кобальт  $A = 3 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$   $M_s = 1.4 \cdot 10^6 \text{ A/M}$ никель  $A = 10^{-11} \text{ J/m}$   $M_s = 4.82 \cdot 10^5 \text{ A/m}$
- Обменная длина:  $l_{ex} \coloneqq \sqrt{2A / (\mu_0 M_s^2)}$  кобальт 4.9 nm, никель 8.3 nm
- Максимальный размер конечного элемента: кобальт 5 nm, никель 6 nm



#### Результаты расчета, состояние остаточной намагниченности

Внешнее магнитное поле было приложено вдоль оси [111] (перпендикулярно поверхности образца, вдоль главной диагонали элементарной ячейки).

Состояние остаточной намагниченности, ИОПС на основе никеля:







Вихрь в октаэдрическом участке (квазикубе) наблюдается во всем диапазоне полей между точками схождения ветвей кривой гистерезиса.

#### Результаты расчета, намагниченность ножек

Проекция намагниченностей ножек ИОПС вдоль осей ножек.



Магнитные моменты ножек могут рассматриваться как изинговские

#### Результаты расчета, кривые гистерезиса





1) Магнитное состояние ИОПС, в основном, определяется магнитными моментами ножек. Скачки на кривых гистерезиса связаны с переворотом магнитных моментов.

2) В больших полях реализуется конфигурация 3-in-1-out.

3) Все квазитетраэдры переходят в конфигурацию 2-in-2-out во внешнем поле, составляющем 50 mT и -25 mT для ИОПС на основе кобальта и никеля (при убывании поля), в связи с тем, что обменная длина кобальта меньше, чем никеля. (4.9 и 8.3 nm)

4) Конфигурация 2-in-2-out стабильна. Переворот магнитного момента в одной ножке, сопровождается переворотом момента и в другой ножке соответствующего тетраэдра так, чтобы правило спинового льда по-прежнему выполнялось. 10

### Размагничивающее поле образца

Элементарная ячейка имеет кубическую форму, образцы, использовавшиеся в экспериментах, представляют собой тонкие пленки — необходимо учесть размагничивающие поле, связанное с формой образца

Размагничивающее поле однородно намагниченной пленки:  $H_z^{\text{dem}} = -M_z \frac{V_{\text{IOLS}}}{V_{\text{CLS}}}$ 

Случай точечных контактов микросфер коллоидного кристалла :

$$V_{\rm IOLS} / V_{\rm film} = 1 - \pi / (3\sqrt{2}) \approx 0.26$$

Случай спекания сфер:  $\frac{V_{\text{IOLS}}}{V_{\text{film}}} = 1 - \frac{\pi}{\sqrt{2}} \left( \frac{k^3}{3} - 3k(k-1)^2 + (k-1)^2 \right)$  k := r' / r

Величина спекания может быть найдена из данных СЭМ: k = 1.02

$$V_{\mathrm{IOLS}} / V_{\mathrm{film}} \approx 0.22$$

Связь внутреннего поля, действующего на элементарную ячейку ИОПС,  $H_{in}$  и внешнего поля, приложенного к образцу в ходе эксперимента  $H_{ext}$ 

$$H_{\rm ext} = H_{\rm in} + 0.22M_z$$





#### Результаты расчета и экспериментальные данные

Кривые гистерезиса были получены методом СКВИД-магнитометрии



Размагничивающее поле сглаживает кривые гистерезиса

- 1. Продемонстрирован изинговский характер поведения магнитных моментов в ножкаперемычках.
- 2. Установлены границы применимости правила спинового льда в ИОПС при приложении внешнего магнитного поля вдоль оси [111].
- 3. Конфигурация 2-in-2-out оказывается более выгодной для ИОПС на основе кобальта, чем для ИОПС, выполненных из никеля.
- 4. Результаты моделирования и данные СКВИД-магнитометрии находятся в количественном согласии.

# Спасибо за внимание!

E-mail: i.dubitsky@phys.spbu.ru

$$F_m = -\int_V 1/2\mu_0 M_S \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_m dV = 1/2\mu_0 \int_{\text{all space}} \mathbf{H}_m^2 dV$$

Энергия минимальна при отсутствии размагничивающего поля. Pole avoidance principle. «Сближение» противоположных зарядов, «нежелательность» объемных зарядов

Уравнения Брауна:

$$\begin{cases} \mu_0 M_s \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\partial V} = 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{2}{\mu_0 M_s} \nabla \cdot (A \nabla \mathbf{m}) - \frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial J_{\text{an}}}{\partial \mathbf{m}} + \mathbf{H}_{\text{m}} + \mathbf{H}_{\text{ext}}$$

- Не позволяют изучать динамику
- Не могут предсказать минимум энергии, в который перейдет система