

Mikromágneses szerkezetek számítógépes vizsgálata

PhD téziszfüzet

Kákay Attila

Témavezető: Dr. Varga Lajos Károly

Magyar Tudományos Akadémia
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

2005

1. Bevezetés

A 60-as években lépett a doménelmélet helyébe a mikromágnesség, amely úgy a doméneket, mint a doménfalakat együtt tárgyalja. A mikromágneses módszer teljes megfogalmazása Brown-nak [1963] köszönhető, aki a következőt állapítja meg: „világos, hogy a mikromágnesség még nem áll készen arra, hogy kiszorítsa a doménelméletet, de legalább képes arra, hogy határozottan és becsületesen támadjon meg olyan kérdéseket, melyeket a doménelmélet mellőz”. A mikromágnesség tíz évvel a browni megalapozás után kezdett hatékonyvá válni, a viszonylag nagy teljesítményű számítógépek megjelenésével.

A mikromágnesség célja az, hogy mikron és szubmikron méretű anyagban a mágneses momentumok eloszlását, azaz a doméneket és doménfalakat tanulmányozza. A doménszerkezetek vizsgálatára létező kísérleti módszerek (Bitter ábra, Kerr mikroszkópia, atomi erő mikroszkóp) csak az anyag felületéről képesek információt nyújtani, míg a mikromágnesség az anyag belsejében is képes leírni a mágneses momentum eloszlását. Sőt, a mikromágneses számolások olyan információkhoz is hozzájuttatnak, mint a különböző mágneses struktúrák energiája.

A mikromágneses közösség javarésze a mágneses információ tárolásban használt anyagok, ezek mágnesezési folyamatának megértésével foglalkozik, különösen az újonnan használatos diszkrét média tanulmányozásával, ahol az egyedülálló részecskék mérete a szuperparamágnesség határán van. Megemlítendő, hogy a mikromágneses számolások tették lehetővé az 1Gbyte/inch² bit sűrűségű merevlemezek vagy az első mágneses aktív memóriák megtervezését. De a mikromágnességnek fontos szerepe van az új nanokristályos kompozitok tanulmányozásában (legyen akár lágymágneses, akár lágymágneses kompozit) vagy a biomedikális alkalmazások számára egyre nagyobb jelentőséggel bíró nanoszemcsék mágneses szerkezetének és mágnesezési folyamatának a vizsgálatában.

Fontos megemlítenünk, hogy a mágnesség történetének utóbbi száz évében (önkéntesen Ewing-tól számolva) a mágneses anyagok fizikai paramétereit, mint a spontán mágnesezettség vagy Curie hőmérséklet, nehéz volt tökéletesíteni, azonban a technikai paraméterek (koercitív tér, permeabilitás, veszteség) esetében több nagyságrendű fejlesztést értek el.

2. Célkitűzések

Az utóbbi időben a mikromágneses számolások egyre fontosabbá váltak mind az alapkutatók mind az ipari alkalmazások számára. Abban segít, hogy megértsük a mágnesezési folyamatokat.

Az első célkitűzésem az volt, hogy tanulmányozzam a Permalloyból készült mágneses író-olvasó fejek doménszerkezetét. A mágneses információ tárolás követelményei a nagy bitsűrűség és a gyors írási-olvasási folyamat. E kettő ellentmond egymásnak, mivel a nagy bitsűrűség kisméretű író-olvasó fejeket feltételez, melyben a mágnesezési folyamatot a Néel falak dinamikája adja, azonban a Néel falak lomhák, ellentétben a Bloch falakkal. A Bloch és Néel falak kölcsönhatnak egymással és úgynevezett cross-tie falakat hoznak létre, melyek központja a függőleges Bloch vonal (VBL). Az egymással kölcsönható VBL-ek szintén lassítják az írás és olvasás sebességét. E témában két kérdést kell megválaszolnunk:

- mely filmvastagságnál alakul át a Bloch fal Néel fallá?
- mekkora a cross-tie típusú falak energiája az egyszerű Bloch és Néel falakhoz viszonyítva (megemlítendő, hogy cross-tie típusú falakat kísérletileg is megfigyeltek)

A második célkitűzésem az volt, hogy tanulmányozzam a nanokristályos anyagokat. A Herzer [1990] által bevezetett modell, nevezetesen a kicserélődési kiátlagolás modellje, amely a véletlenszerű bolyongáson alapszik egy fenomenológikus modell. A Herzer modellt még a mai napig is sokan támadják és az volt a szándékom, hogy a mikromágneses számítások segítségével ellenőrizzem a modell helyességét. Sajnos a mikromágneses számításokat csak kis térfogatú mintára lehet elvégezni, ahol a magnetosztikus energia vagy másszóval lemágnesező energia jelentős szerephez jut. Ez egyenértékű egy alak-anizotrópiával. Herzer azonban végtelen (tömbi) anyagra állította fel modelljét, ahol csak az anizotrópia és a kicserélődési energia versenyzik egymással.

A harmadik célkitűzés az egydülálló nanokristályos szemcsék világához kapcsolódik. Az orvostudományban mindennapi kérdés, hogy a gyógyszert vagy ellenanyagot céltudatosan a megfelelő helyre tudják eljuttatni. A terv egyszerű, a ma használt anyagok hatékonysága rossz. A tudomány abban áll, hogy a nanokristályokat,

melyek néhány tíz nanométer átmérőjűek, a szervezet számára befogadható anyaggal vonják be (így keletkezik a mágneses gyöngyszem), majd sejtláncokat fűznek ezen gyöngyszemekre, melyekhez a továbbiakban orvosság vagy ellenszer kapcsolható. Ha ezen felruházott mágneses gyöngyszemeket a véráramba juttatjuk, egy mágneses tér segítségével oda vihetjük, ahol a kívánt gyógyítást el akarjuk érni. Azonban a ma használatos nanoszemcsék mágneses vasoxidok, melyek telítési mágnesezettsége kicsi, ezáltal az általuk szállítható teher is kicsi. Szándékom az volt, hogy kiszámoljam különböző anyagok monodomén-vortex átmenetét, mely egy irányelv lenne, hogy a ma használatos vasoxid szemcséket mire érdemes lecserélni. Ezenkívül egy módszert dolgoztam ki a genetikus algoritmusra alapozva, hogy ezen nem kölcsönható nanoszemcsék méreteloszlását meghatározzam mágneses mérések segítségével, mely kivitelezése sokkal könnyebb mint más módszerek (pld. TEM, XRAY, SANS). Ezt a módszert Langevin granulometriának neveztük el, és azon alapszik, hogy a nem kölcsönható nanokristályok mágnesezési görbéje szuperparamágneses állapotban a Langevin függvényt követik, melynek alakja csak a szemcsék méretének eloszlásától függ.

3. Alkalmazott módszerek

3.1 Mikromágnesség

A mikromágnesség a doméneket és doménfalakat a mágnesezettség folytonos függvényeként tárgyalja, melynek nagysága állandó azonban irányítottága pontról pontra változik. A mágnesezettség minden egyes elemi térfogatának időbeli változását a nemlineáris Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet írja le

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} \left[\vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_S} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) \right] \quad (1)$$

ahol a H_{eff} egy effektív tér mely magába foglalja az anizotrópia, kicserélődési, lemágnesezési és külső teret, γ a giromágneses arány és α a Gilbert féle csillapítási együttható. A doménfalak mozgásának vagy a doménszerkezetek mágnesezettségi eloszlásának a vizsgálatához a minta térfogatát diszkrét elemi térfogatokra osztjuk, feltételezve, hogy minden egyes elemi cellában a mágnesezettség állandó, majd ezekre

megoldjuk az LLG egyenletet. Általában néhány százezer elemi cellára osztjuk a vizsgálandó mintákat.

Minden egyes elemi cella mágnesezettsége egy egységvektorral van definiálva $\vec{m}(m_x, m_y, m_z)$ és egyben egy elemi térfogatnak felel meg, melyet az A kicserélődési együttható, a K anizotrópia konstans, az M_S telítési mágnesezettség, a γ giromágneses arány és az α csillapítási paraméter jellemez. Ezek a számolási folyamat bemenő paraméterei, azaz az anyagi jellemzők, melyek meghatározzák az elemi cella méretét.

A kiindulási mágnesezettségi eloszlásfüggvény minden egyes számolás esetében más és más lehet, néhány esetben célszerű elméleti megoldásokat használni vagy egyszerűen egy véletlenszerű eloszlását a mágnesezettségi egységvektoroknak.

3.2. Langevin granulometria

Szemcseméret eloszlással rendelkező nem kölcsönható szuperparamágneses részecskék esetében, a különböző hőmérsékleteken mért mágnesezési görbék egymásra tevődnek az $M(H,T)/M_S(T)$ -nek az $M_S(T)H/T$ függvényében vett ábrázolásban, amely leírható Langevin függvények szuperpozíciójával. A görbe alakja csupán a szemcseméret eloszlástól függ, ezért granulométerként használható, hogy meghatározzuk a szemcseméret (vagy mágnesezési momentum) eloszlást. Habár számos más módszer létezik a szemcseméret eloszlásának meghatározására (TEM, SANS, etc.), a mágnesezési módszer sokkal könnyebben kivitelezhető kísérletileg. Természetesen ez a módszer is ugyanazokkal a nehézségekkel küszködik mint bármely más, nevezetesen, hogy a fizikai rendszer egyértelműen meghatározza a mért eredményeket, azonban a fordított probléma, hogy meghatározzuk a fizikai rendszer paramétereit a mért adatokból nem egyértelmű.

Egy szemcseméret eloszlással rendelkező szuperparamágneses minta mágnesezettsége a következő képlettel adható meg

$$M(H, T) = \sum_{i=1}^N w_i \mu_i \text{Lang} \left(\frac{\mu_0 \mu_i H}{k_B T} \right) \quad (2)$$

ahol $w_i = w_i(\mu_i)$ az i típusú, egységnyi térfogatú részecskék száma, melyek μ_i momentummal rendelkeznek.

A feladat azt, hogy meghatározzuk a mágneses momentumok eloszlását, azaz a $w_i(\mu_i)$ -t, mely közvetlen kapcsolatban áll a szemcsék méretével, a kísérleti mágnesezési görbéből, $M(H, T)$.

4. Új tudományos eredmények

1. A Bloch-Néel doménfal átmenetre a Permalloy film vastagságát sokkal pontosabban kiszámoltam. A korábbiakban meghatározott 80-90 nm ([Labonte, 1969][Hubert, 1998]) helyett a 30-35 nm-es tartományt kaptam [1]. Ezenkívül kimutattam, hogy a szimmetrikus Bloch fal egészen 35 nm-es [1] vastagságig létezik, a korábbiakban kiszámolt 100 nm-hez képest [Labonte, 1969]. Ezek a számolások fontos szerepet játszanak a merevlemezek író-olvasó fejeinek tervezése szempontjából
2. Az átmeneti filmvastagságnál (10-70 nm) tanulmányoztam a Bloch és Néel falak kölcsönhatását és viszakaptam a kísérletileg megfigyel [Huber, 1958][Hubert, 1998] cross-tie típusú falakat [2]. Kiszámoltam ezen falak energiáját és vastagságát a Permalloy film vastagságának függvényében [2]. Mivel ezek nem felületi falak, egyetlen kísérleti módszerrel sem tudjuk pontosan meghatározni ezeket az értékeket. Azt kaptam, hogy az átmeneti tartományban energetikailag sokkal kedvezőbb konfiguráció egy cross-tie típusú fal mint egy egyszerű Bloch vagy Néel fal. Ezen számolások az író-olvasó fejek közti árnyékoló Permalloy film viselkedésére engednek következtetni.
3. Mikromágneses számolásokkal tanulmányoztam a nanokristályos anyagokra az erősen csatolt fázisra alkalmazott, a véletlenszerű bolyongásra alapozott, fenomenológikus Herzer-modellt. A szemcseméret változtatásával (a nanoszemcsék anizotrópia tengelyeinek iránya véletlenszerű eloszlású) vizsgáltam az effektív kristálytani anizotrópia állandóval jellemezhető doménfal-szélesség változását, és a várt összefüggést, a szemcseméret köbének reciprokával való arányosságot találtam [3]. Ezen számolások bizonyítják, hogy a random anizotrópia modell levezetésére használt nagyságrendi becslések helyesek.

4. Mikromágneses számolásokkal, először az irodalomban, megbecsültem a monodomén-vortex átalakulás kritikus átmérőjét, gömb alakú lágymágneses nanoszemcsékre [4]. A Brown [1968] által analitikus számolásokkal kapott két kritikus átmérő a mikromágneses számolásokból is kijön, D_{mono} , D_{vortex} . A $[0, D_{mono}]$ intervallumban a szemcsénk monodomének, míg a D_{vortex} fölött az úgynevezett könnyű irányú vortex állapot létezik. Az ismeretlen köztes intervallumra azt kaptam, hogy a magnetosztatikus energia minimalizálása érdekében egy nehéz irányú vortex [4] állapot jelenik meg. Ezek a számolások tájékoztató jellegűek a biomedikális alkalmazások számára (biológiai markerek, hipertermiás kezelés).
5. Egy módszert és egy ehhez kapcsolódó számítógépes programot dolgoztam ki a genetikus algoritmusra alapozva, hogy meghatározzam a nanokristályos szemcsék méreteloszlását a szuperparamágneses mágnesezési görbékből, minden féle kezdeti feltételezéstől eltekintve az eloszlás alakjára vonatkoztatva [5]. Habár sok más módszert alkalmaztak, hogy a mágnesezési görbéből visszakapják a szemcseméret eloszlást, a honlapomról letölthető program [<http://www.szfki.hu/~attilak/software.html>] a legmegbízhatóbb a kísérleti görbék értelmezésében. Ez lehetővé teszi a Langevin granulometriát mágneses méréseken keresztül, akár egypúpú akár többpúpú eloszlások esetén.

5. Hivatkozások

- [Brown, 1963]: W.F. Brown, Jr., 1963 *Micromagnetics* John Wiley & Sons, New York.
- [Ewing, 1885]: J.R. Ewing, 1885 *Philosophical Transactions of the Royal Society -- Part II*. pp. 523-640, plus plates 57-68.
- [Herzer, 1990]: G. Herzer, 1990 *IEEE Trans. Magn.* **26** 1397.
- [Labonte, 1969]: A.E. Labonte, 1969 *J. Appl. Phys.* **40** 2450-2458.
- [Hubert, 1998]: A. Hubert, R. Schäfer *Magnetic Domains* ISBN 3-540-64108-4 Springer p. 110.
- [Huber, 1958]: E.E. Huber, JR., D. O. Smith, and J. B. Goodenough, 1958 *J. Appl. Phys.* 29(3) 294-295.
- [Redjdal, 1998]: M. Redjdal, Ph.D. thesis (Boston University)

6. Tudományos közlemények

- [1] T. Trunk, M. Redjdal, **A. Kákay**, M.F. Raune and F.B. Humphrey, *Domain wall structure in Permalloy films with decreasing thickness at the Bloch to Néel transition*, 2001 *J. Appl. Phys.* **89(11)** 7606-7608.
- [2] M. Redjdal, **A. Kákay**, M.F. Raune and F.B. Humphrey, *Cross-tie walls in thin Permalloy films*, 2002 *IEEE Trans. Magn.* **38(5)** 2471-2473.
- [3] **A. Kákay** and L.K. Varga, *Micromagnetic simulation of random anisotropy model*, 2004 *J. Magn. Magn. Mat.* **272-276** 741-742
- [4] **A. Kákay** and L.K. Varga, *Monodomain critical radius for soft-magnetic fine-particles* accepted for publication in *J. Appl. Phys.* in Feb. 2005
- [5] **A. Kákay**, M.W. Gutowski, L. Takács, V. Franco and L.K. Varga, *Langevin granulometry of particle size distribution*, 2004 *J. Phys. A.: Math. Gen.* **37** 6027-6041.