

文章编号: 1004-0609(2006)08-1400-05

# 磁性镍纳米线矫顽力随角度变化规律的微磁学模拟<sup>①</sup>

张腊梅<sup>1</sup>, 郭光华<sup>1, 2</sup>, 韩念梅<sup>1</sup>

(1. 中南大学 物理科学与技术学院, 长沙 410083;

2. 中南大学 粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083)

**摘 要:** 采用微磁学模拟的方法对不同直径有限长 Ni 纳米线的矫顽力随角度(外磁场与纳米线长轴之间的夹角)的变化关系  $H_c(\theta)$  进行了研究。结果表明: 矫顽力随角度的变化规律随着纳米线直径的增大而改变; 当直径小于临界直径  $d_0$  (39 nm) 时, 纳米线矫顽力随着角度的增大而单调减小; 当直径大于临界直径  $d_0$  时, 矫顽力随角度的变化表现出较复杂的关系, 出现零角度局域极大现象以及中间某一角度的极大现象。从反磁化机制的角度对矫顽力随角度的变化规律进行了解释。

**关键词:** 镍纳米线; 微磁学; 矫顽力; 角度; 反磁化机制

中图分类号: O 482.5

文献标识码: A

## Micromagnetic simulation of angular dependence of coercivity of magnetic nanowires

ZHANG La-mei, GUO Guang-hua, HAN Nian-mei

(1. School of Physics Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China;

2. State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China)

**Abstract:** Angular dependence of the coercivity  $H_c(\theta)$  of magnetic nanowires with different diameters was investigated by micromagnetic simulation, where  $\theta$  is defined as the angle between the field direction and wire length). The results show that  $H_c(\theta)$  significantly depends on the nanowire diameter. For the nanowire diameter smaller than a critical diameter  $d_0$  (39 nm), the coercivity decreases as the angle increases. For the diameters larger than the critical diameter, the angular dependence of coercivity has a complicated form. There are a local maximum at zero angle and a peak at middle angle on the  $H_c(\theta)$  curve. The angular dependence of coercivity is interpreted in terms of magnetization reversal mechanism.

**Key words:** Ni nanowire; micromagnetics; coercivity; angle; magnetization reversal mechanism

近年来, 磁性纳米线阵列由于可作为高密度垂直磁记录介质而受到人们的高度重视, 人们采用多孔模板通过电化学沉积的方法制得规则的纳米线阵列, 并通过各种手段研究它们的微结构和磁特性<sup>[1~12]</sup>。磁性纳米线的反磁化机制一直是人们积极研究的课题之一<sup>[4~12]</sup>。早在 1957 年 Frei 等<sup>[7]</sup>就对

无限长圆柱体的反磁化机制进行了研究, 认为存在某一临界直径  $d_0 = 2\sqrt{A/M_s}$  (其中  $A$  为交换作用系数,  $M_s$  为饱和磁化强度), 当纳米线直径小于  $d_0$  时, 反磁化过程为一致反转模式, 当直径大于  $d_0$  时反磁化过程为涡旋式反转模式。纳米线矫顽力随角度(外磁场与纳米线长轴之间的夹角)的变化规律

① 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60571043); 湖南省自然科学基金资助项目(04JJ3078)

收稿日期: 2005-09-06; 修订日期: 2006-03-02

通讯作者: 郭光华, 教授, 博士; 电话: 0731-8836443; E-mail: guogh@mail.csu.edu.cn

$H_c(\theta)$  与反磁化机制有着密切的关系, 根据 Frei 等<sup>[7]</sup>对无限长圆柱体的研究结果, 对于一致反转模式, 矫顽力随着角度的增加而减小; 对于涡旋式反转模式, 矫顽力随着角度增加而增加; 而当纳米线直径接近于  $d_0$  时, 由于低角度时发生涡旋式反转, 高角度时发生一致反转, 因此矫顽力先随角度的增大而增大, 然后随角度的进一步增大而减小, 即在中间角度出现矫顽力极大现象。人们从实验上对磁性纳米线的反磁化机制和矫顽力随角度的变化规律  $H_c(\theta)$  也进行了大量研究<sup>[8-12]</sup>, 但由于制备工艺和实验条件的不同, 其结论也不一致。

张腊梅等<sup>[13]</sup>对有限长 Ni 纳米线的反磁化机制也进行了详细的研究, 发现其反磁化机制与 Frei 等<sup>[7]</sup>对无限长圆柱体的研究结果并不一致。当纳米线直径小于 Ni 的临界直径(39 nm)时, 反磁化机制为一致畴壁反磁化核的形成与传播, 即首先在纳米线两端形成反磁化核, 然后反磁化核畴壁沿纳米线长轴逐渐向中间移动直至完全反转, 反磁化核畴壁的截面微磁结构为一致结构。当纳米线直径大于临界直径时, 反磁化过程为涡旋畴壁反磁化核模式, 其仍然是反磁化核首先在纳米线两端形成, 然后逐渐向中间移动直至完全反转, 但反磁化核畴壁的截面微磁结构为涡旋结构。随着直径进一步增大, 反转模式变为多畴涡旋中心的移动。本文作者在此基础上采用微磁学模拟的方法进一步研究了不同直径有限长 Ni 纳米线的矫顽力随角度的变化规律  $H_c(\theta)$ , 并从反磁化机制的角度对其进行解释。

## 1 理论模型

微磁学是一个连续介质近似模型, 它认为除居里温度附近外, 铁磁材料的饱和磁化强度  $M_s$  的绝对值是一个常量, 不随外场和在磁体中的位置变化而改变。它利用总自由能最小原理来确定磁体平衡状态下的磁矩分布。忽略磁弹性能和表面各向异性能, 系统的总自由能可分成如下几部分:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{ex}} + E_{\text{an}} + E_{\text{d}} + E_{\text{Zee}} \quad (1)$$

式中  $E_{\text{ex}}$  为交换能;  $E_{\text{an}}$  为磁晶各向异性能;  $E_{\text{d}}$  为退磁能;  $E_{\text{Zee}}$  为塞曼能。

磁矩从一个稳定状态到另一个稳定状态的变化过程遵循 Gilbert 动态方程:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \left[ \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right] \quad (2)$$

式中  $\mathbf{M}$  是磁化强度矢量;  $\gamma$  是旋磁比;  $\alpha$  是阻尼系

数; 有效场  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  定义为自由能的变分;  $\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_0} \cdot$

$\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{M}}$  它提供作用在磁化强度矢量上的实际力矩。

模拟基于有限差分的思想, 把纳米线进行适当的网格划分, 假定每个网格内磁矩分布是均匀的, 给定一初始的磁矩分布, 计算每个网格内的有效场并求解 Gilbert 方程, 得到磁化强度矢量的动力学变化过程, 从而获得磁体的微磁结构分布<sup>[14]</sup>。实际的纳米线是接近于圆柱形的, 为了便于网格划分我们的模拟是基于形状完全对称的长条, 研究表明采用条形和采用圆柱体产生的误差不会超过 5%<sup>[15]</sup>, 实验中也对相应尺寸的圆柱状纳米线进行了模拟检验, 发现差别非常小。材料参数取 Ni 的值: 饱和磁化强度  $|M_s| = 4.9 \times 10^5$  A/m; 交换作用系数  $A = 9 \times 10^{-12}$  J/m; Ni 纳米线的磁晶各向异性性能相对于形状各向异性性能(来源于退磁能)来说可以忽略<sup>[16]</sup>, 所以取磁晶各向异性常数  $K = 0$ , 阻尼系数  $\alpha$  取为 0.5。模拟时所有纳米线长径比均取 10。

## 2 结果与讨论

在对 Ni 纳米线进行微磁学模拟时, 沿与纳米线长轴不同夹角的方向加足够大的场, 使纳米线沿该方向饱和磁化, 然后逐渐把外场减小到相反方向, 就得到不同方向上的磁滞回线, 进而得到矫顽力随角度的变化关系  $H_c(\theta)$ 。当外场与纳米线长轴平行时夹角为  $0^\circ$ , 外场与纳米线长轴垂直时夹角为  $90^\circ$ 。

图 1 所示为不同直径纳米线矫顽力随角度的变化规律  $H_c(\theta)$ 。由图 1(a) 可见, 当纳米线直径为 30 nm 时(小于 Ni 纳米线的临界直径 39 nm), 矫顽力随着角度增加单调减小, 从  $0^\circ$  到  $10^\circ$  减小比较迅速,  $10^\circ$  到  $60^\circ$  之间变化比较缓慢,  $60^\circ$  以后又有明显的减小趋势。

根据 Frei 等<sup>[7]</sup>的无限长纳米线理论模型, 当直径小于临界直径  $d_0$  时, 纳米线的反磁化过程为一致反转且对所有角度都一样, 矫顽力随着角度的增加而减小, 其变化趋势与图 1(a) 基本一致, 但在数值上有较大的差别<sup>[7]</sup>。根据本研究的模拟结果, 当直径小于临界直径时, 有限长纳米线的反磁化过程为一致畴壁反磁化核的形成与传播。这是由于有限长纳米线的两端具有较强的退磁场, 易形成反磁化核; 而无限长纳米线没有端点, 各点完全等价, 因此反磁化过程在纳米线的各处同时开始, 形成一致

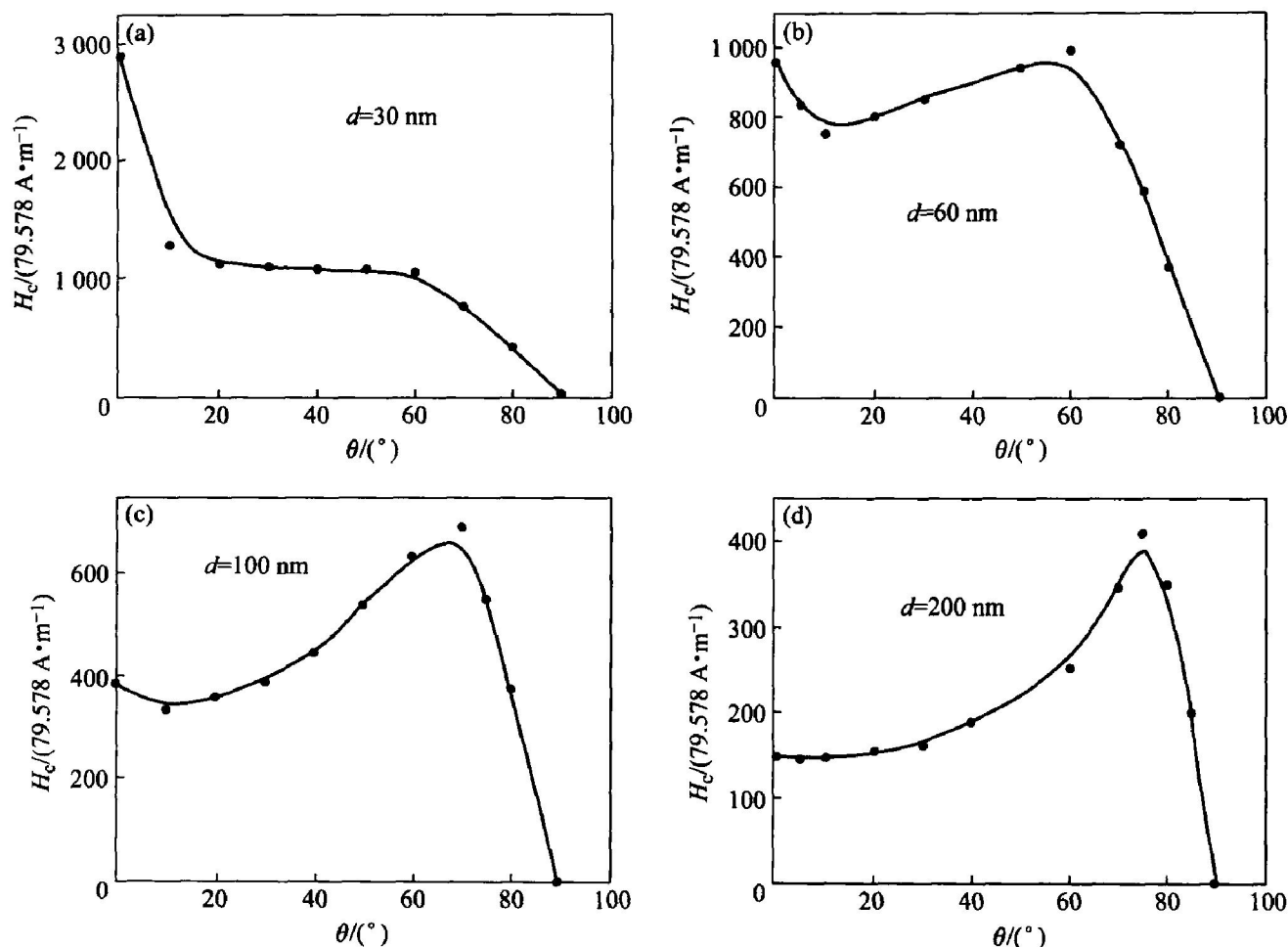


图1 不同直径纳米线矫顽力随角度的变化关系

Fig. 1 Angular dependence of coercivity on angle of nanowire with different diameters

(a) —30 nm; (b) —60 nm; (c) —100 nm; (d) —200 nm

反转过程。但两种反磁化机制也有共同之处,即有限长纳米线一致畴壁反磁化核的截面微磁结构与无限长纳米线一致反转过程中的截面微磁结构是一样的,都是一致结构。因此,有限长和无限长纳米线的矫顽力随角度的变化规律其趋势基本一致,但在具体数值又有较大的差别。许多实验研究结果也表明,当直径小于临界直径时,纳米线矫顽力随角度的变化趋势也是随着角度的增加而减小<sup>[17, 18]</sup>。

从图 1(b)~(d) 可以看出,当纳米线直径大于 Ni 纳米线临界直径  $d_0$  时,  $H_c(\theta)$  曲线与纳米线小于临界直径时的  $H_c(\theta)$  有很大的差别。小角度时矫顽力随角度的增大而减小,随着角度的进一步增大,矫顽力开始增大,当角度增到某一值时矫顽力达到极大值,随后角度增大,矫顽力开始减小,90° 时矫顽力为零。矫顽力出现零角度局域极大和中间某一角度的极大现象,且随着纳米线直径的增加,零角度局域极大现象逐渐消失,矫顽力出现峰值的中间角度也越来越高。

根据无限长纳米线的反磁化理论模型<sup>[7]</sup>,当纳

米线直径大于临界直径  $d_0$  时,对所有角度的反磁化机制都是涡旋反转模式,这时矫顽力随着角度的增大而增大,90° 时达到极大;只有当纳米线直径处于  $d_0$  附近时,低角度时发生涡旋式反转,高角度时发生一致反转,导致矫顽力先随角度升高而增大,随后随角度的进一步升高而减小,即在中间角度出现峰值。而我们对有限长纳米线的模拟结果显示对所有大于  $d_0$  的纳米线其  $H_c(\theta)$  都在中间角度出现峰值。

对上述矫顽力随角度的变化规律可以从反磁化机制来解释。根据本研究的模拟结果,对有限长纳米线,当直径大于临界直径时,其反磁化机制都随角度的变化而改变。当角度大于中间  $H_c$  峰值所对应的角度时,其反磁化过程为一致畴壁反磁化核的形成与传播,这一反磁化机制所对应的矫顽力随角度的增加而减小;当角度小于  $H_c$  峰值角度时,反磁化过程为涡旋畴壁反磁化核的形成与传播,此时矫顽力随角度的升高而增大,这与无限长纳米线涡旋反转模式所对应的矫顽力随角度变化趋势一致。

事实上, 这两种反磁化机制有其共同之处, 即有限长纳米线的涡旋畴壁反磁化核的截面微磁结构与无限长纳米线涡旋反转过程中的截面微磁结构是一样的, 都是一涡旋结构。正是由于有限长纳米线反磁化机制随角度变化而发生的上述改变, 导致其矫顽力在中间某一角度出现峰值。模拟结果还表明, 由涡旋畴壁反磁化核模式变为一致畴壁反磁化核模式随对应的角度随纳米线直径的增大而增大, 相应的矫顽力峰值所对应的角度也增大。许多理论和实验研究结果也表明, 当纳米线直径大于临界直径时其矫顽力也在中间角度出现峰值。Huysmans 等<sup>[10]</sup>的理论分析表明, 直径为 42.5 nm (远大于临界直径 13 nm) 的单根 Fe 纳米线矫顽力的最大值出现在 70°。对直径为 200 nm 的 Ni 纳米线和 Fe 纳米线阵列的  $H_c(\theta)$  的实验研究也显示其矫顽力最大值出现在 60°处<sup>[19]</sup>。但 Wernsdorfer 等<sup>[11]</sup>对直径为 92 nm 的 Ni 纳米线  $H_c(\theta)$  的测量结果显示矫顽力随角度的升高而增大, 90°时达到极大值。需要指出的是, 本文作者模拟的纳米线长径比均为 10, 而实验上制备的纳米线长径比一般大于 100。模拟结果显示, 对于相同直径的纳米线, 长径比越大矫顽力峰值对应的角度越高。

直径大于临界直径  $d_0$  时, 纳米线矫顽力随角度变化规律的另一个特点是出现零角度局域极大现象(如图 1(b) 和 (c)), 且随着纳米线直径的增加, 零角度局域极大现象逐渐消失。许多实验结果证实了矫顽力在零角度局域极大现象的存在。对单根 Ni 纳米线  $H_c(\theta)$  的实验研究表明, 直径为 50 nm 的纳米线发现矫顽力在零角度的局域极大现象, 当直径增加到 92 nm 时零角度局域极大现象消失<sup>[11]</sup>。Wegrowe 等<sup>[12]</sup>对 Ni 纳米线的测量结果也表明零角度时矫顽力的局域极大现象, 并且他们认为零角度的局域极大现象是磁晶各向异性性能引起的, 如将磁晶各向异性性能考虑到无限长纳米线模型中, 就会在零角度出现矫顽力的局域极大。我们在模拟中设定磁晶各向异性常数为零, 但同样出现零角度矫顽力局域极大现象, 可见磁晶各向异性性能不是主要原因。在我们的模拟中发现, 出现零角度矫顽力局域极大现象时, 在零角度附近纳米线的反磁化过程是涡旋畴壁反磁化核模式; 直径增大, 零角度矫顽力局域极大现象消失时, 零角度附近纳米线的反磁化过程变为多畴涡旋中心的移动。零角度附近纳米线反磁化机制的改变应该是矫顽力零角度局域极大的形成与消失的原因。

### 3 结论

采用微磁学模拟的方法系统的研究了不同直径有限长 Ni 纳米线的矫顽力随角度的变化规律  $H_c(\theta)$ 。研究结果表明, 矫顽力随角度的变化规律随着纳米线直径的增大而改变。对于直径小于临界直径  $d_0$  的纳米线,  $H_c(\theta)$  随着角度的增大而单调减小, 且对于所有角度其反磁化机制都是一致畴壁反磁化核的形成与传播。直径大于  $d_0$  的纳米线, 反磁化过程随角度的变化而改变, 发生从涡旋畴壁反磁化核模式向一致畴壁反磁化核模式的转变, 从而导致矫顽力在中间某一角度出现峰值。直径大于  $d_0$  时还在零角度出现矫顽力局域极大现象, 随着纳米线直径的增大, 这一现象消失。零角度矫顽力局域极大的出现与消失也与纳米线反磁化机制有着密切的关系。

### REFERENCES

- [1] LI Tao, YANG Shao-guang, HUANG Li-sheng, et al. Anisotropic magnetization in arrays of coupled Ni nanowires[J]. Chin Phys Lett, 2004, 21(41): 729 - 732.
- [2] Strijkers G J, Dalderop J H J, Broeksteeg M A A, et al. Structure and magnetization of arrays of electrodeposited Co wires in anodic alumina[J]. J Appl Phys, 1999, 86(9): 5141 - 5145.
- [3] Liu Q F, Gao C X, Xiao J J, et al. Size effects on magnetic properties in Fe<sub>0.68</sub>Ni<sub>0.32</sub> alloy nanowire arrays[J]. J Magn Magn Mater, 2003, 260: 151 - 155.
- [4] Aharoni A, Shtrikman S. Magnetization curve of the infinite cylinder[J]. Phys Rev, 1958, 109(5): 1522 - 1528.
- [5] Hertel R, Kirschner J. Magnetization reversal dynamics in nickel nanowires[J]. Physica B, 2004, 343: 206 - 210.
- [6] Ferré R, Ounadjela K, George J M, et al. Magnetization processes in nickel and cobalt electrodeposited nanowires[J]. Phys Rev B, 1997, 56(21): 14066 - 14075.
- [7] Frei E H, Shtrikman S, Treves D. Critical size and nucleation field of ideal ferromagnetic particles[J]. Phys Rev, 1957, 106(3): 446 - 455.
- [8] Han G C, Zong B Y, Luo P, et al. Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowires arrays[J]. J Appl Phys, 2003, 93(11):

- 9202 - 9207.
- [ 9] Lederman M, óBarr R, Schultz S. Experimental study of individual ferromagnetic sub-micro cylinders [ J]. IEEE Trans Magn, 1995, 31(6): 3793 - 3795.
- [ 10] Huymans G T A, Lodder J C. Magnetization curling in perpendicular iron particle arrays (alumite media) [ J]. J Appl Phys, 1988, 64(4): 2106 - 2021.
- [ 11] Wernsdorfer W, Doudin B, Mailly D, et al. Nucleation of magnetization reversal in individual nanosized nickel wires [ J]. Phys Rev Lett, 1996, 77(9): 1873 - 1876.
- [ 12] Wegrowe J E, Kelly D, Franck A, et al. Magnetoresistance of ferromagnetic nanowires [ J]. Phys Rev Lett, 1999, 82(18): 3681 - 3684.
- [ 13] 张腊梅, 郭光华, 刘正方. 磁性纳米线反磁化机制的微磁学模拟 [ J]. 中国有色金属学报, 2005, 15(5): 787 - 792.
- ZHANG Lǎ mei, GUO Guang-hua, LIU Zheng-fang. Micromagnetic simulation of magnetization reversal mechanism in magnetic nanowires [ J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2005, 15(5): 787 - 792.
- [ 14] Donahue M J, Porter D G. OOMMF User's Guide, Release 1. 2a [ EB/OL]. <http://math.nist.gov/oommf/>, October 30, 2002.
- [ 15] Abelman L, Zhu J G, Bain J A, et al. Micromagnetic simulation of a flux guide for a read head with sub-100 nm resolution [ J]. J Appl Phys, 2000, 87(9): 5538 - 5540.
- [ 16] Skomski R, Zeng H, Sellmyer D J. Incoherent magnetization reversal in nanowires [ J]. J Magn Magn Mater, 2002, 249: 175 - 180.
- [ 17] XUE Kuang-hong, PAN Gu-ping, PAN Ming-hu, et al. Magnetic behaviour of arrays of nickel nanowires with small diameter [ J]. Superlattices and Microstructures, 2003, 33: 119 - 129.
- [ 18] ZHU Hao, YANG Shao-guang, NI Gang, et al. Fabrication and magnetic properties of Fe<sub>14</sub>Ni<sub>86</sub> alloy nanowire array [ J]. J Phy: Condens Matter, 2003, 13: 1727 - 1731.
- [ 19] 铁晨阳, 包建春, 徐 正. 制备条件对金属纳米线阵列磁性的影响 [ J]. 材料研究学报, 2002, 16(5): 463 - 468.
- TIE Chen-yang, BAO Jian-chun, XU Zheng. Influence of preparation conditions on the magnetic properties of an array of metal nanowires [ J]. Chinese Journal of Materials Research, 2002, 16(5): 463 - 468.

(编辑 何学锋)