

缺陷对钴纳米环磁特性的影响

郭永健, 温川鑫, 颜克雄, 傅啦啦, 黄倩南, 叶晴莹*

福建师范大学, 物理与能源学院, 福建 福州

收稿日期: 2022年3月22日; 录用日期: 2022年4月22日; 发布日期: 2022年4月29日

摘要

基于蒙特卡洛方法与快速傅里叶变换微磁学方法, 模拟了缺陷钴纳米环的磁化特性。研究发现, 缺陷纳米环磁滞回线的过渡状态较多, 系统自旋组态较丰富。当缺陷的Y值不同时, 系统均出现双稳态。系统的剩磁与Y值明显相关: 当Y值较小而系统保持对称状态时, 剩磁接近于零; 随着Y值的增大, 系统的剩磁逐渐增大; 当Y值增大到一定范围内, 剩磁变化减小, 出现一个平台区; 继续增大Y值, 剩磁又逐渐减小。模拟结果与实验结果一致。

关键词

蒙特卡洛方法, 快速傅立叶变换微磁学方法, 缺陷钴纳米环, 磁特性

Effect of Defects on Magnetic Properties of Cobalt Nanorings

Yongjian Guo, Chuanxin Wen, Kexiong Yan, Lala Fu, Qiannan Huang, Qingying Ye*

College of Physics and Energy, Fujian Normal University, Fuzhou Fujian

Received: Mar. 22nd, 2022; accepted: Apr. 22nd, 2022; published: Apr. 29th, 2022

Abstract

Based on Monte Carlo method and fast Fourier transform micromagnetism method, the magnetization characteristics of defective cobalt nanorings are simulated. It is found that there are many transition states of hysteresis loops in defective nanorings, and the spin configurations of the systems are rich. When the Y value of the defects is different, the systems appear bistable. The remanence of the systems is obviously related to the Y value: when the Y value is small and the systems remain symmetrical, the remanence is close to zero; with the increase of Y value, the remanence of the system increases gradually; When the Y value increases to a certain range, the change of re-

*通讯作者。

manence decreases and a platform area appears; as the Y value continues to increase, the remanence decreases gradually. The simulation results are consistent with the experimental results.

Keywords

Monte Carlo Method, Fast Fourier Transform Micromagnetic Method, Defective Cobalt Nanorings, Magnetic Properties

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

近些年来,磁性材料一直是科学界的研究热点[1] [2] [3] [4]。由于磁性纳米环材料体系存在独特的磁性,在生物医学、逻辑电子器件、磁存储等领域备受关注。在生物医学中,具有涡旋磁畴的磁性纳米环,由于独特的涡旋态和磁化翻转特性,使其具有更优异的磁学性能,在生物医学领域展现出了更好的应用优势和潜力[5]。早在上世纪 50 年代 Gilchrist 就证实了将磁性材料导入或植入肿瘤区域,在交变磁场作用下能够快速升温加热肿瘤组织,从而达到肿瘤治疗的目的[6]。在逻辑电子器件领域中,由于磁性纳米结构具有可调的畴壁结构,使其可应用于多种工业用途,Allwood 等人报道了一种逻辑门,该研究通过磁场调制的方法制备出的磁性纳米线逻辑门具有可调控的畴壁[7]。在磁存储领域,中国科学院物理研究所对新型纳米环型磁随机存储器(MRAM)的研究发现,纳米环不但可以大幅提高存储密度,还可以显著减少传统 MRAM 的结构问题,并有望突破 MRAM 产品化的瓶颈,这为促进 MRAM 芯片的开发和未来产业化奠定了基础[8]。纳米环在生产过程中常会出现缺陷[9],在实际生产应用中,缺陷的形貌各有不同。因此除了常规圆形的缺陷[9],研究其他形状缺陷对纳米环的影响也是十分重要的。

2. 模型与方法

模拟中缺陷钴纳米环的模型如图 1,纳米环外半径 R ,内半径 r ,缺陷由半径 $r' = 20$ nm 的圆形缺陷和边长 $a = 30$ nm、 $b = 10$ nm 的矩形缺陷重叠构成。缺陷的圆心与矩形中心重合,其坐标为(0, Y)。

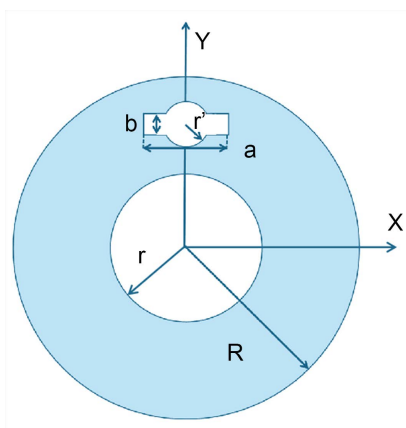


Figure 1. Model of defective cobalt nanorings

图 1. 缺陷钴纳米环模型

本工作通过传统蒙特卡洛(Monte Carlo, 简称 MC)方法与快速傅里叶变换微磁学方法的相互结合进行模拟计算[9] [10]。其中 MC 方法用于模拟系统的交换能、各向异性能、塞曼能[9], 快速傅里叶变换微磁学方法用于模拟系统的偶极能[10], 所有格点都纳入计算。采用有限元算法, 在海森堡模型(Heisenberg)下, 体系的哈密顿量表示为[9]:

$$E = -\sum_{ij} JS_i \cdot S_j + D \left[\sum_{ij} \frac{S_i \cdot S_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(S_i \cdot r_{ij})(S_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - K v_0 \sum_i (S_i \cdot u_i)^2 - M_s v_0 H \sum_i S_i \cdot h \quad (1)$$

其中 S_i 为纳米环点内第 i 个原子自旋, $J = 2Ad_1\pi/6$, d_1 是划分的小球体的直径, A 是球间的交换相互作用常数; 第 2 项为偶极能, D 是偶极相互作用常数, $D = (M_s v_0)^2/2$, 其中 M_s 是饱和磁化强度, $v_0 = \pi d^3/6$ 是小球体积, r_{ij} 代表第 i 个自旋与第 j 个自旋之间的间距; 第 3 项为各向异性能, K 是磁各向异性常数; u_i 是第 i 个自旋的磁各向异性易轴的单位矢量; 第 4 项为塞曼能, H 是外加磁场, h 代表沿外场方向的单位矢量。

对于钴纳米环, 模拟中采用的参数为 $A = 1.3 \times 10^{-15}$ J/m, $M_s = 1.43 \times 10^6$ A/m, $K = 0$ [9]。令磁场水平向右(以 x 轴正方向为磁场正方向), 模拟温度设为 300 K, 外磁场的变化范围从 -2000 Oe 到 2000 Oe [11]。本工作在对圆形缺陷磁性钴纳米环的研究成果上[9] [11], 通过改变缺陷形貌, 模拟缺陷钴纳米环的磁化过程, 分析得到系统的磁特性。

3. 结果与讨论

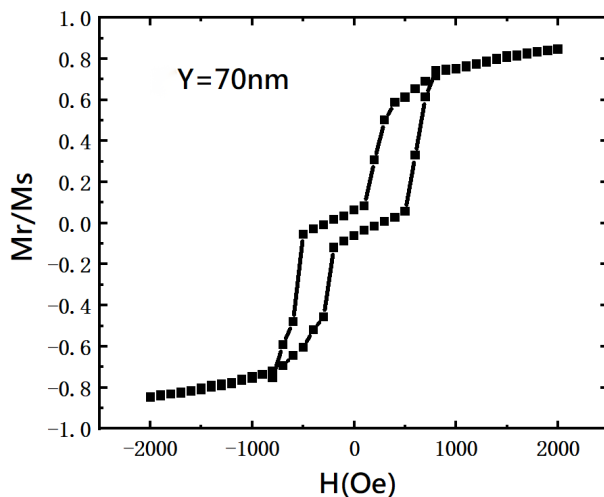


Figure 2. Hysteresis loop of defective cobalt nanoring

图 2. 缺陷钴纳米环磁滞回线

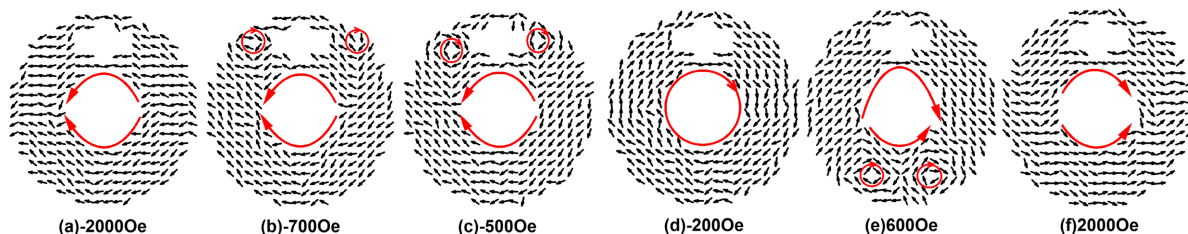


Figure 3. Spin configurations of defective cobalt nanorings

图 3. 缺陷钴纳米环自旋组态

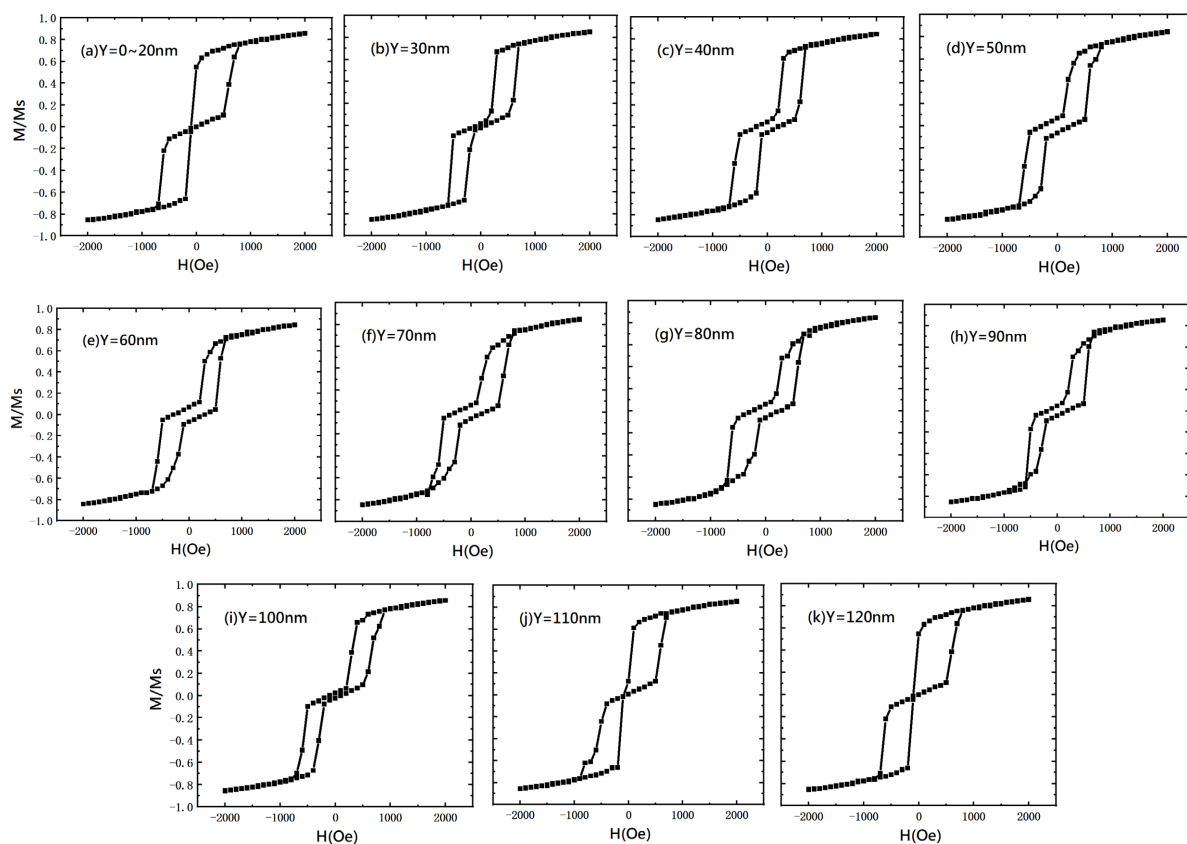


Figure 4. The variation of hysteresis loops of defective cobalt nanorings with Y value

图 4. 缺陷钴纳米环磁滞回线随 Y 值的变化

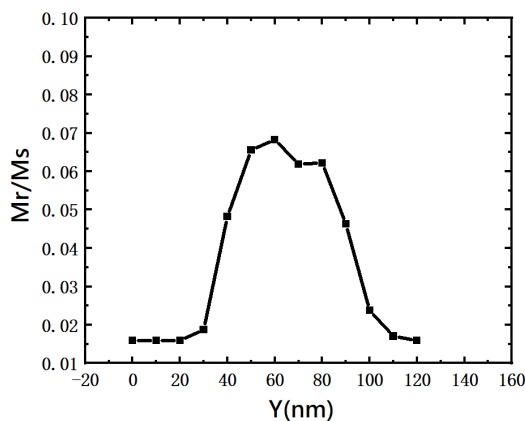


Figure 5. The variation of the remanence with the Y value

图 5. 剩磁随 Y 值的变化

图 2 是当 $Y = 70 \text{ nm}$ 时缺陷钴纳米环的磁滞回线。从图 2 中可以看到，该缺陷的纳米环存在“双稳态”特征，即磁滞回线两端的近饱和态台阶和中间台阶[11]。对比圆形缺陷钴纳米环，发现系统的存在更多的过渡状态[9]。

为了系统地研究缺陷钴纳米环的磁特性，本工作进一步模拟了系统的自旋组态，如图 3 所示。研究发现，系统具有丰富的自旋组态形式。

在图 3 中, 当 $H = -2000$ Oe 时, 系统呈现的“洋葱态”(如图 3(a)); 随着磁场的减少, 在 $H = -700$ Oe 时, 在纳米环上半部分缺陷周围中出现一对“局部涡旋态”(如图 3(b)); 继续减少磁场, 可以发现在 $H = -500$ Oe 时“局部涡旋”依然存在, 但位置已经发生了下移(如图 3(c)); 直到 $H = -200$ Oe 时“局部涡旋”消失, 形成“涡旋态”(如图 3(d)), 并持续维持到 $H = 500$ Oe [9]; 当 $H = 600$ Oe 时, 在纳米环下半部分出现一对“局部涡旋态”(如图 3(e)); 结合图 2, 可知“局部涡旋态”将在 $H = 800$ Oe 时消失, 并形成反向“洋葱态”[11], 此状态持续维持到 $H = 2000$ Oe (如图 3(f))。

为了研究缺陷位置对系统的影响, 我们模拟了 Y 值从 0 nm 到 120 nm 的缺陷钴纳米环的磁滞回线, 如图 4。从图 4 中可以看出, 不同 Y 值条件下, 系统均存在“双稳态”的特征。当 $Y = 0 \sim 20$ nm 时(如图 4(a)), 缺陷被内环吞并, 即系统未出现缺陷, 因此其磁滞回线与无缺陷纳米环的形态一致[11]; 逐渐增大 Y 值, 当 $Y = 30$ nm 时(如图 4(b)), 由于系统此时缺陷较小, 其磁滞回线与无缺陷纳米环的形态接近, 但磁能积稍小; 继续增大 Y 值, 当 $Y = 40 \sim 100$ nm 时(如图 4(c)~(i)), 发现系统出现了比较明显的剩磁; 当 Y 值 = 1100 nm 时~ 120 nm 时(如图 4(j)~(k)), 系统的剩磁又几乎恢复为零值。研究发现, 当 $Y \geq 120$ nm 时, 缺陷从上方移出纳米环, 此时系统再次恢复为无缺陷形态, 其磁滞回线也再次出现无缺陷纳米环磁滞回线的形态[12]。

纳米环系统的剩磁处多呈现“涡旋态”, 该形态是磁记录材料中关键的存储状态[11]。因此研究剩磁对纳米环的实际应用具有重要意义。为了详细阐述系统剩磁的变化规律, 我们在图 5 中呈现了剩磁随 Y 值变化的模拟结果。从图 5 中可以看出, 当 $Y = 0 \sim 20$ nm 时, 系统剩磁几乎为零, 而 $Y = 20$ 到 30 nm 时剩磁开始增大; 当 Y 从 60 nm 增大至 80 nm 时, 剩磁大小变化并不明显, 呈现一个相对稳定的平台区; 当 Y 从 80 nm 继续增大时, 剩磁又开始降低。这一变化趋势与圆形缺陷钴纳米环的剩磁的变化趋势相似[9], 并与实验结果接近[13]。这一研究结果对纳米环制备中产生的缺陷问题有一定的指导意义。

4. 结论

本工作利用快速傅里叶变换微磁学方法与蒙特卡洛(Monte Carlo)相结合的方法, 模拟了缺陷纳米环磁化过程, 分析了缺陷钴纳米环的磁特性。研究发现, 本工作中的纳米环系统存在丰富的自选组态。缺陷钴纳米环的磁特性与 Y 值息息相关: 虽然不同 Y 值条件下系统均出现双稳态, 但 Y 值会对磁滞回线的形态及系统的剩磁产生明显影响。模拟结果与实验结果接近。

致 谢

本论文感谢福建省自然科学基金(2021J01191), 福建省本科教育教学改革项目(FBJG20210295, I202101007), 福建师范大学 2021 年省级大学生创新训练计划项目((S202110394015, cxxl-2021244)。

参考文献

- [1] Chen, Y.H. and Zhang, J.F. (2017) Effect of Crystal Morphology on Magnetic Structure of Nano-Magnetites. *Solid State Communications*, **250**, 92-98. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2016.11.021>
- [2] Avila, J., Tumelero, M., Pasa, A.A. and Viegas, A.D.C. (2015) Magnetoresistive System with Concentric Ferromagnetic Asymmetric Nanorings. *Journal of Applied Physics*, **117**, Article ID: 103901. <https://doi.org/10.1063/1.4914346>
- [3] Zhou, K., Wang, X.K. and Li, S.C. (2017) Tunable Storage States Transition in Slotted Ferromagnetic Nanoring. *Journal of Applied Physics*, **121**, Article ID: 123905. <https://doi.org/10.1063/1.4978966>
- [4] Xu, J., Du, C.X., Du, Y.Y., Jia, Q., Liu, Y.H. and Wu, Z.M. (2018) First-Principles Calculations of Magnetoelectric Properties of New Diluted Magnetic Semiconductor Mn-Doped LiZnN. *Chinese Journal Of Computational Physics*, **35**, 711-719.
- [5] 吴建鹏, 刘晓丽, 张欢, 张艺凡, 骆艳娥, 樊海明. 涡旋磁纳米颗粒——崭新的生物医用磁性纳米平台[J]. 生物化学与生物物理进展, 2015, 42(7): 593-605.

- [6] 杨沂. 功能性镍钴合金环磁性纳米复合材料的制备及在肿瘤诊断与磁热疗中的应用[D]: [硕士学位论文]. 合肥: 合肥工业大学, 2019.
- [7] Allwood, D.A., Xiong, G., Faulkner, C.C., Atkinson, D., Petit, D. and Cowburn, R.P. (2005) Magnetic Domain-Wall Logic. *Science*, **309**, 1688-1692.
- [8] 韩秀峰. 纳米环磁性隧道结及新型纳米环磁随机存取存储器的基础研究[J]. 中国科技成果, 2015(6): 258-260.
- [9] Yek, Q., Chen, S., Huang, S., Wu, J., Xu, J., Wang, W., Fan, W. and Huang, Z. (2019) Magnetic Dynamic Properties of Defective Cobalt Nanorings: Monte Carlo Simulation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **473**, 301-305. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.10.038>
- [10] 钟克华, 冯倩, 翁臻臻, 黄志高. 快速傅立叶变换微磁学方法[J]. 计算物理, 2005(6): 64-68.
- [11] 林枝钦. 纳米环的磁特性的数值计算[D]: [硕士学位论文]. 福州: 福建师范大学, 2009.
- [12] 邓楚楚, 张鑫源, 陈水源, 吴宇晗, 叶晴莹, 黄志高. 小缺陷铁纳米环的磁特性[J]. 计算物理, 2020, 37(4): 473-478.
- [13] Zhu, F.Q., Chern, G.W., Tchernyshyov, O., Zhu, X.C., Zhu, J.G. and Chien, C.L. (2006) Magnetic Bistability and Controllable Reversal of Asymmetric Ferromagnetic Nanorings. *Physical Review Letters*, **96**, Article ID: 027205. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.027205>