

INSTYTUT FIZYKI POLSKIEJ AKADEMII NAUK
W WARSZAWIE



Krzysztof Lebecki

**Mikromagnetyczne modelowanie rozkładu
namagnesowania w kwazjednowymiarowych
ferromagnetykach:
analiza wpływu periodycznych warunków brzegowych**

Praca doktorska wykonana w Instytucie Fizyki PAN
Promotor: prof. dr hab. **Jacek Kossut**

Warszawa 2008

Renacie, oczywiście

Podziękowania

Chciałbym serdecznie podziękować profesorowi Jackowi Kossutowi za kierownictwo naukowe, inspiracje i pomoc w trakcie trwania tej pracy.

Profesorom Grzegorzowi Karczewskiemu i Tomaszowi Wojtowiczowi jestem wdzięczny za stworzenie warunków do efektywnej pracy w zespole SL3.

Doktorowi Markowi Gutowskiemu dziękuję za cierpliwe prowadzenie mnie przez meandry fizyki magnetyzmu.

Koleżankom i kolegom z zespołu SL3 dziękuję za serdeczną atmosferę i wielokrotną pomoc.

Chciałbym również podziękować wszystkim, którzy się przyczynili w ten czy w inny sposób, często nieświadomie i niebezpośrednio, do tego, że mogłem napisać tę pracę. Dziękuję zatem: Ewie Lebeckiej, Sławkowi Lebeckiemu, Janinie Skowrońskiej†, Pani Erentraud Peyer†, Zygmuntowi Ajzert†, Bogdanowi Leśniewskiemu, Jadwidze Niedziałek†, Wierze Oliferuk, Renacie Lebeckiej, Andrzejowi Kotlickiemu, Zbigniewowi Liro, Andrzejowi Twardowskiemu, Andrzejowi Golnikowi, Panu Nguyen The Khoi, Janowi Gajowi, Marianowi Grynbergowi, Janowi Dubowskiemu, Danielowi Dobrowolskiemu, Robertowi Sendysowi, Michałowi Lebeckiemu, Kalinie Lebeckiej, Janowi Bandrowskiemu†, Małgorzacie Tomal.

Last and certainly not least: this work could not be done without great help of Michael Donahue from NIST. Thank you Mike for your time and continuous support.

Spis treści

1	Wstęp	7
2	Wprowadzenie do mikromagnetyzmu numerycznego	14
2.1	Teoria mikromagnetyzmu według Browna.....	14
2.2	Mikromagnetyzm numeryczny, wprowadzenie siatki podziału	22
2.3	Tensor odmagnesowania	27
2.4	Periodyczne warunki brzegowe w mikromagnetyzmie	34
2.5	Regularne siatki podziału, twierdzenie o splocie	46
3	Opracowana metoda uwzględniania PBC.....	53
3.1	Wprowadzenie	54
3.2	Własności tensora N^{PBC}	58
3.3	Dokładność numeryczna wzorów Newella	59
3.4	Uwzględnienie nieskończonego zasięgu oddziaływania dipolowego	68
3.5	Kontrola błędów	74
3.6	Podsumowanie	75
4	Wyniki i zastosowania przedstawionej metody	79
4.1	Nieskończony drut o przekroju kołowym	80
4.2	Nieskończona rurka o przekroju kołowym	91
4.3	Nieskończona belka o przekroju prostokątnym.....	96
4.4	Pętla histerezy nanorurek kobaltowych	101
4.5	Płaskie macierze trójkątów	108
5	Podsumowanie i wnioski	120
6	Dodatki.....	123
6.1	Pole dodatkowe.....	123
6.2	Opis obsługi modułu OOMMF-PBC	127
	Literatura.....	134

W pracy stosowany jest układ jednostek SI.

Wielkości wektorowe są oznaczane przez pogrubienie, jak np. namagnesowanie $\mathbf{M}$, natomiast wartości skalarne są oznaczane czcionką pochyłą, jak np. energia odmagiesowania E_d . Tensor odmagiesowania oznaczany jest inną czcionką: $\mathbf{N}$, choć jego elementy, $N_{\alpha\beta}$, są oznaczane tak jak skalary. Analogiczny standard jest przyjęty w podręczniku Blundella [1].

Dla ułatwienia podano poniżej listę często stosowanych terminów i ich znaczenie.

- Komórka

Obszar modelowania jest podzielony w procesie dyskretyzacji na mniejsze części, zwane *komórkami*, patrz ust. 2.2. W tym kontekście można mówić o siatce dyskretyzacji. Siatka dyskretyzacji jest regularna, gdy wszystkie komórki mają ten sam kształt i rozmiar.

- Długość modelowania

Obszar modelowania ma określone wymiary. Rozważając periodyczne warunki brzegowe w jednym wymiarze, długość tego obszaru (w kierunku periodyczności warunków brzegowych) ma duże znaczenie i będzie w tej pracy określana jako *długość modelowania*, patrz ust. 2.4.1.

- Obraz

Periodyczne warunki brzegowe, zgodnie z definicją Borna, polegają na określeniu obszaru modelowania i rozważaniu nieskończonej liczby powtórzeń tego obszaru (ust. 2.4). Każde takie powtórzenie będzie określane jako *obraz*.

Stosowane skróty i oznaczenia.

A	Stała wymiany (ang. <i>exchange constant, continuum exchange constant, exchange stiffness coefficient</i>)	n	Całkowita liczba komórek
d	Długość modelowania	$\mathbf{N}$, $N_{\alpha\beta}$	Tensor odmagiesowania, elementy tego tensora ($\alpha\beta = xx, xy, \dots, zz$)
E	Energia	$\mathbf{N}^{\text{PBC}}$	Tensor odmagiesowania dla przypadku PBC
E_d	Energia odmagiesowania (ang. <i>demagnetization energy</i>)	n_x, n_y , n_z ,	Liczba komórek, odpowiednio wzdłuż osi x, y, z
FD	Programy oparte na metodzie różnic skończonych (ang. <i>finite difference</i>). Patrz ust. 2.2	PBC	Periodyczne warunki brzegowe (ang. <i>periodic boundary conditions</i>)
$\mathbf{H}_d$	Pole odmagiesowania	$\mathbf{r}$	Wektor położenia
$\mathbf{H}_{\text{eff}}$	Pole efektywne	T	Temperatura
$\mathbf{H}_{\text{ext}}$	Pole zewnętrzne	V	Objętość zajmowana przez dane ciało
H_n	Pole nukleacji, w rozważanych tu przypadkach równoważne koercji	V_{el}	Objętość komórki
K	Stała anizotropii	λ_{ex}	Długość wymiany (ang. <i>exchange length</i>). Konkretnie: długość wymiany Néela.
k_B	Stała Boltzmanna	μ_0	Przenikalność magnetyczna próżni
$\mathbf{M}$	Namagnesowanie		
$\mathbf{m}$	Moment magnetyczny		
M_s	Namagnesowanie nasycenia		

1 Wstęp

Obserwowane ostatnio zainteresowanie strukturami o obniżonej wymiarowości ma dwojakie przyczyny. Z jednej strony widoczna jest ciągła presja przemysłu komputerowego intensywnie poszukującego nowych technologii [2], z drugiej strony mamy rozwój technik wzrostu kryształów, który nastąpił w ostatnich latach. Wiele z obecnie popularnych metod hodowli kryształów opiera się na zasadzie samoorganizacji (ang. *self-assembly*) [3] i pozwala na otrzymywanie struktur kwazijedno- i kwazizero-wymiarowych. Wśród tych metod są i takie, które nie wymagają wielkich nakładów, jak na przykład CVD (ang. *chemical vapor deposition*), czy osadzanie elektrolityczne przy wykorzystaniu matryc porowatych. Struktury kwazijednowymiarowe wytwarzane przy pomocy takich technik mają z reguły kształty drutów, rur i kabli – o przekrojach kołowych. Z racji ich małych rozmiarów poprzecznych (średnice rzędu nanometrów) nazywamy je odpowiednio nanodrutami, nanorurkami i nanokablami. Zwłaszcza te ostatnie, zbudowane na bazie rurki wypełnionej innym materiałem, oferują interesujące nowe możliwości. Można bowiem w ten sposób wytwarzać heterostruktury ferromagnetyk-półprzewodnik, ciekawe z powodu ich potencjalnych zastosowań [4]. Wiele z układów otrzymanych w wyniku samoorganizacji ma budowę macierzową, gdzie w jednym procesie jest wytwarzanych wiele (np. miliony) kwazijednowymiarowych struktur rozmieszczonych w regularny sposób, może to być na przykład grupa równoległych nanodrutów ułożonych w siatkę heksagonalną. Takie układy zrobione z ferromagnetyka mogą być stosowane jako pamięci nieulotne, nie wymagające zasilania do podtrzymania zapisanej w nich informacji – MRAM (ang. *magnetic random access memory*). Ze względu na nieuniknione w procesie samoorganizacji błędy strukturalne, rozważane są również możliwości funkcjonowania

urządzeń „bezpiecznych” opartych na takich próbkach, urządzeń, które byłyby odporne na istnienie tych błędów [5].

Właściwości magnetyczne kwazijednowymiarowych obiektów są często przedmiotem doświadczeń. Stąd, w literaturze można znaleźć szereg publikacji dotyczących nanodrutów ferromagnetycznych [6-13], pojawiają się też publikacje na temat nanorurek [14-21] (praca [20] jest ciekawa, bo prezentowane są pomiary nie tylko dla całej matrycy, ale i dla dwóch wyodrębnionych nanodrutów) i nanokabli [17, 22].

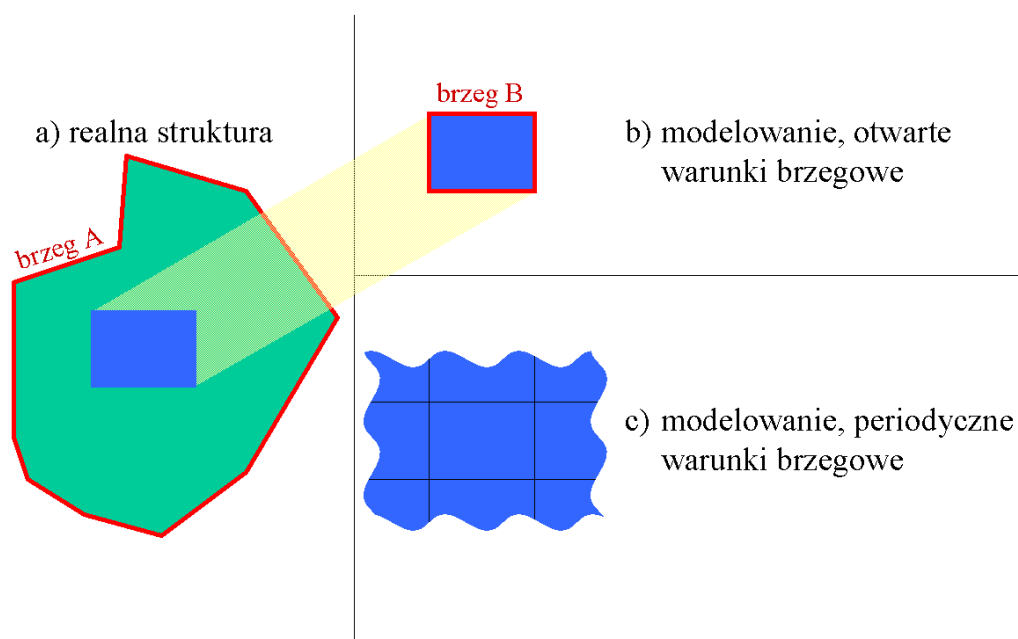
Formalizmem opisującym zjawiska magnetyczne zachodzące w nanoskali w materiałach ferromagnetycznych jest sformułowany przez Browna mikromagnetyzm [23] (niektórzy autorzy preferują nazwę „nanomagnetyzm” jako bardziej pasującą do opisywanych skali długości [24, 25]). Niestety równania mikromagnetyzmu, przedstawione przeze mnie bardziej szczegółowo w ust. 2.1, są skomplikowane. W rezultacie przypadki, które możemy opisać analitycznie są nieliczne i dotyczą raczej prostych kształtów próbki, jak np. problem histerezy nieskończonego nanodrutu (patrz ust. 4.1.1). W tej sytuacji modelowanie numeryczne jest często jedynym dostępnym narzędziem rachunkowym, którego wyniki można konfrontować z wynikami doświadczalnymi. Modelowanie pozwala nie tylko tłumaczyć wyniki eksperymentu, ale i je przewidywać – co jest bardzo istotne przy projektowaniu nowych urządzeń bazujących na efektach magnetycznych w mikroskali (jak np. komputerowe dyski twarde). Od czasu pionierskich prac Browna i LaBonte [26, 27] nastąpił znaczący rozwój mikromagnetyzmu numerycznego i jest to obecnie często stosowane podejście^{*}. Dysponujemy szeregiem sprawdzonych przez wielokrotne użytkowanie programów, z jednej strony pozwalających na elastyczne definiowanie rozważanych struktur (np.

^{*} Prawie połowa publikacji z zakresu mikromagnetyzmu odwołuje się do modelowania (na podstawie danych z bazy OVID’2007).

język Tcl i pliki konfiguracyjne w programie OOMMF [28]), a z drugiej strony, zauważalna jest tendencja do tworzenia programów „interdyscyplinarnych”, opisujących nie tylko zjawiska magnetyczne, ale i powiązane z nimi zagadnienia, jak na przykład przepływ prądu elektrycznego (program „nmag” [29]). W rezultacie, obok opisanych w poprzednim akapicie prac doświadczalnych, można znaleźć prace przedstawiające modelowanie magnetycznych struktur kwazijednowymiarowych: nanodrutów [30-33] i nanorurek [34-36]. Mimo zauważalnego rozwoju mikromagnetyzmu numerycznego nadal jednak jesteśmy ograniczeni przez możliwości dostępnych komputerów. Analiza numeryczna wymaga podziału próbki na komórki, przez wprowadzenie siatki dyskretyzacji (ust. 2.2). Współczesne komputery klasy PC nie są w stanie prowadzić obliczeń w rozsądnym czasie jeśli liczba komórek przekracza znacznie 10^5 – ograniczeniem jest głównie brak odpowiedniej mocy obliczeniowej. Z drugiej strony, rozmiary komórek powinny być odpowiednio małe (ust. 2.2), choć nie wszyscy autorzy stosują się do tego kryterium [30, 35]. Problem nie jest palący, gdy np. modelowane są nanorurki o małym stosunku* długość:średnica [36], albo gdy można z góry założyć określony kształt rozkładu namagnesowania w nanorurce [34].

W ogólnym jednak przypadku, gdy dostępny rozmiar modelowanego obszaru jest dużo mniejszy od próbki obserwowanej w doświadczeniu (np. długiej nanorurki), mamy do wyboru dwie możliwości zilustrowane na Rys. 1-1.

* Mowa tu o zewnętrznej średnicy nanorurki. Mały stosunek długość:średnica, to wielkość rzędu jeden.



Rys. 1-1 Przypadek realnej struktury, zaznaczonej na zielono (a), której rzeczywiste rozmiary są dużo większe od dostępnego obszaru modelowania, zaznaczonego na niebiesko. W takim wypadku, w modelowaniu czasami korzysta się z otwartych warunków brzegowych, czyli z rozważania tylko fragmentu próbki (b). Jest to równoznaczne z niejako sztucznym wprowadzeniem brzegu B. Z kolei okresowe warunki brzegowe ignorują istnienie jakiegokolwiek brzegu (c). Rysunek schematyczny.

Pierwsza z tych możliwości, to tak zwane otwarte warunki brzegowe (ang. *open boundary conditions*, *free boundary conditions*). Polegają one na uwzględnieniu jedynie wybranego fragmentu realnej próbki (obszar niebieski, Rys. 1-1 a) i modelowaniu go tak jakby był on otoczony próżnią (Rys. 1-1 b). Druga możliwość, to okresowe warunki brzegowe, wprowadzone po raz pierwszy przez Borna [37, 38] (zwane warunkami Borna-von Karmana, Rys. 1-1 c). Widać, że każde z tych rozwiązań jest przybliżeniem, każde z nich ignoruje istnienie brzegu „A” realnej próbki. Zamiast tego, otwarte warunki brzegowe wprowadzają istnienie sztucznego brzegu „B”, natomiast okresowe warunki brzegowe ignorują istnienie jakiegokolwiek brzegu. Każde z tych rozwiązań zaniedbuje kształt próbki, co jak się okaże później może mieć istotne znaczenie. Każde z tych rozwiązań jest więc w pewnym sensie złe. Kwestię, kiedy w mikromagnetyzmie stosować otwarte, a kiedy okresowe warunki brzegowe,

omówię dokładniej w ust. 2.4. Tam też porównam dokładniej stosowanie periodycznych warunków brzegowych w mikromagnetyzmie i w innych działach fizyki ciała stałego. Na razie chciałbym jedynie zwrócić uwagę na istotną rolę periodycznych warunków brzegowych przy badaniu niskowymiarowych struktur^{*}, w tym próbek kwaziejednowymiarowych. Wydaje się bowiem niewłaściwe, by przy modelowaniu zbyt dużych struktur[†] stosować zawsze otwarte warunki brzegowe. Periodyczne warunki brzegowe są dla nich dobrym, alternatywnym rozwiązaniem, gdyż dzięki nim można analizować wpływ nieuwzględnionego w modelowaniu obszaru (Rys. 1-1, zaznaczony na zielono). Trzeba przy tym pamiętać o długozasięgowym charakterze oddziaływania dipolowego. O ile bowiem otwarte warunki brzegowe są bardzo proste w implementacji, to narzucenie periodycznych warunków brzegowych jest zagadnieniem trudnym, właśnie ze względu na długozasięgowe oddziaływania dipolowe (ust. 2.4). Dlatego w mikromagnetyzmie numerycznym często jest wprowadzane arbitralne ograniczenie ich zasięgu. Podejście polegające na sztucznym ograniczeniu zasięgu oddziaływań dipolowych jest jednak niebezpieczne, na co wskazują autorzy badający to zagadnienie [39-41]. Zaproponowane przeze mnie rozwiązanie oparte jest na bardzo prostym pomysłu. Polega ono na faktycznym uwzględnieniu nieskończonego zasięgu oddziaływania dipolowego i jednoczesnym uważnym kontrolowaniu generowanych w trakcie modelowania błędów. Dzięki takiej kontroli możliwe jest:

- Stosowanie najodpowiedniejszej metody obliczeń na poszczególnych etapach procesu. Przypomina to trochę konstrukcję Ewalda [42], co bardziej szczegółowo opisuję w rozdziale trzecim.

^{*} Problem stosowania periodycznych warunków brzegowych w trzech wymiarach, do opisu próbek objętościowych, jest kwestią sporną. Niektórzy autorzy twierdzą, że jest to niemożliwe, inni że wręcz przeciwnie. Będzie to szerzej omówione w ust. 2.4.

[†] Określenie „zbyt duża struktura” dotyczy próbki, której wymiary znacznie przekraczają dostępne możliwości numeryczne. W modelowaniu mikromagnetycznym z reguły najbardziej ograniczeni jesteśmy przez zbyt małą moc obliczeniową procesorów.

- Decydowanie o jakości wyników końcowych. W rezultacie możliwe jest prowadzenie obliczeń „zgrubnych” (gdy czas jest czynnikiem decydującym), jak i dokładnych aż do granic określonych przez dostępny sprzęt komputerowy.

Aby ułatwić korzystanie z zaproponowanego przeze mnie algorytmu, stworzyłem specjalny moduł implementujący okresowe warunki brzegowe w jednym wymiarze w otwartej domenie środowiska OOMMF [28]. Stworzona specjalnie w tym celu strona WWW ma ułatwić potencjalnym użytkownikom korzystanie z tego modułu [43]. Stosowanie okresowych warunków brzegowych (PBC, ang. *periodic boundary conditions*) w precyzyjnych badaniach mikromagnetycznych istotnie poszerzy bieżące możliwości modelowania. Dzięki PBC będzie możliwe wiarygodne modelowanie większych (dłuższych), mezoskopowych struktur. Badania podłużnych struktur ferromagnetycznych mają z pewnością przed sobą przyszłość, zaś ugruntowana pozycja modelowania jako narzędzia ważnego w rozwoju przemysłu półprzewodnikowego [2] pozwala mieć nadzieję na aplikacyjne zastosowania niniejszej pracy.

Warto wspomnieć, że problematyka modelowania mikromagnetycznego była już podejmowana w Instytucie Fizyki PAN. Dr Nedelko analizował w swojej pracy doktorskiej materiały granularne [44]. Korzystał przy tym z własnego programu modelującego koncentrując się nie tyle na opisie stosowanej metody obliczeniowej (umożliwiającej zresztą stosowanie okresowych warunków brzegowych), ile na analizie wyników doświadczalnych, wpływie parametrów strukturalnych i na oddziaływaniach wewnątrz- i między-fazowych. Tematem niniejszej pracy jest natomiast jak najdokładniejsze uwzględnienie okresowych warunków brzegowych. Przy okazji wskazywane są często stosowane w podobnych pracach przybliżenia, jak obcięcie zasięgu oddziaływania dipolowego, lub kontrowersyjne kwestie, jak stosowalność okresowych warunków brzegowych w trzech wymiarach.

Rozprawa składa się z następujących części. W rozdziale drugim opisuję podstawy ułatwiające zrozumienie omawianych przeze mnie zagadnień. Rozdział trzeci zawiera opis zaproponowanego przeze mnie rozwiązania. Rozdział czwarty przedstawia wykonane przeze mnie testy i zastosowania zaproponowanego modelu. Całość kończą podsumowanie i dodatki. Praca powstała dzięki wsparciu uzyskanemu z Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego, grant nr 1346/B/H03/2007/33.

Elementy doktoratu zostały lub zostaną opublikowane w pracach:

- 1) Lebecki, K.M., O. Kazakova, M.W. Gutowski, *Micromagnetic simulations of hysteresis in an array of cobalt nanotubes*. Physica B, 2008. **403**(2-3): p. 360-363.
- 2) Lebecki, K.M., *Magnetization reversal modeling for long ferromagnetic nanotubes*. Materials Science-Poland (przyjęte do druku).
- 3) Lebecki, K.M., M.J. Donahue, M.W. Gutowski, *Periodic boundary conditions for demagnetization interactions in micromagnetic simulations*. J. Phys. D: Appl. Phys. (w recenzji).

2 Wprowadzenie do mikromagnetyzmu numerycznego

2.1 Teoria mikromagnetyzmu według Browna

W ustępie tym zostanie omówiony model teoretyczny zaproponowany przez Browna [23]. Teoria ta służy opisywaniu zjawisk występujących w ciałach ferromagnetycznych w skali nanometrów i mikrometrów. Z takiego podejścia wynika skupienie się nie tyle na poszczególnych momentach magnetycznych, lecz raczej na zjawiskach uśrednionych po rozmiarach rzędu stałej sieciowej. Problem takiego uśredniania został opisany przez Jacksona ([45], ust. 6.7). O uśrednionej w ten sposób funkcji namagnesowania $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ zakłada się w mikromagnetyzmie, że jest ciągła i różniczkowalna [23].

Kwestie uwzględnienia temperatury w rozważaniach mikromagnetycznych są nietrywialne. Warte wzmianki popularne obecnie metody modelowania tego problemu, to zaproponowane niedawno równanie Landaua-Lifshitz-Blocha [46] (w odróżnieniu od równania Landaua-Lifshitz-Gilberta, które opisuję w ust. 2.1.6), lub analiza powierzchni energii (w przestrzeni fazowej) preferująca pewne „naturalne” ścieżki ewolucji czasowej układu [47]. W poniższej pracy jednak, wszystkie rozważania będą dotyczyć przypadku zerowej temperatury, $T = 0$. Za każdym razem zatem, gdy będę się odwoływać do terminu „energia”, to tak na prawdę będę miał na myśli energię swobodną (energię Gibbsa). Ograniczając się do stosowanych najczęściej rodzajów oddziaływań, energia danej struktury ferromagnetycznej może być zgodnie z teorią mikromagnetyzmu opisana równaniem [23]:

$$E = E_{\text{Zeeman}} + E_{\text{exch}} + E_{\text{aniso}} + E_{\text{d}}, \quad (2.1)$$

gdzie poszczególne człony prawej strony równania i odpowiadające im oddziaływania są omówione w poniższych ustępach.

2.1.1 Energia Zeemana

$$E_{\text{Zeeman}} = -\mu_0 \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} dV, \quad (2.2)$$

gdzie całkowanie odbywa się po całej objętości danej próbki, V .

Energia Zeemana opisuje oddziaływanie ferromagnetycznego ciała z przyłożonym zewnętrznym polem $\mathbf{H}_{\text{ext}}$. W wyniku tego oddziaływania, preferowana jest sytuacja, gdy namagnesowanie $\mathbf{M}$, jest równoległe do pola $\mathbf{H}_{\text{ext}}$.

2.1.2 Energia wymiany

W modelu Heisenberga energia oddziaływania wymiennego pomiędzy dwoma spinami $\mathbf{S}_i$ i $\mathbf{S}_j$ jest równa

$$-J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.3)$$

gdzie J_{ij} to całka lub stała wymiany ([1], str. 74). W mikromagnetyzmie dalsze rozważania zwykle ogranicza się do oddziaływania pomiędzy najbliższymi sąsiadami dla przypadku kryształów kubicznych (lub posiadających strukturę gęstego upakowania) – stąd dalej będę się posługiwać tylko jedną stałą J . Gdy kąt pomiędzy sąsiednimi spinami jest mały, po odjęciu stałej (w rezultacie czego $E_{\text{exch}} = 0$, gdy rozkład namagnesowania jest jednorodny) oraz przyjmując ciągłość ośrodka, prowadzącą do opisu przy użyciu ciągłej funkcji $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ – równanie (2.3) można sprowadzić do następującej zależności na energię dla całej próbki ([1], str. 82)

$$E_{\text{exch}} = \int_V \frac{A}{M_s^2} (\nabla \mathbf{M})^2 dV, \quad (2.4)$$

gdzie M_s jest namagnesowaniem nasycenia, a całkowanie odbywa się po całej objętości, V . Stała A , wprowadzona po raz pierwszy przez Browna w 1940 roku [48, 49]^{*}, jest nazywana stałą wymiany i wynosi

$$A = JS^2 z / a, \quad (2.5)$$

gdzie $S = |\mathbf{S}_i|$, a jest odległością pomiędzy sąsiednimi spinami, natomiast stała z wynosi 1, 2, 4 odpowiednio dla sieci kubicznej prostej, centrowanej przestrzennie i powierzchniowo, natomiast dla struktury gęstego upakowania $z = 2\sqrt{2}$. W niniejszej pracy rozważane są wyłącznie izotropowe oddziaływania ferromagnetyczne, zatem $A > 0$. W wyniku oddziaływania wymiennego preferowana jest sytuacja jednorodnego namagnesowania próbki $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \text{const}$.

2.1.3 Energia anizotropii magnetokrystalicznej

Często zdarza się, że jednorodne namagnesowanie próbki ferromagnetycznej o izotropowym kształcie nie jest izotropowe, czyli że energia układu zależy od kierunku namagnesowania. Miarą anizotropii jest różnica energii pomiędzy przypadkiem namagnesowania wzdłuż kierunku „trudnego” i „łatwego” – czyli, gdy energia jest odpowiednio największa i najmniejsza. Badając układy monokrystaliczne okazuje się, że anizotropia jest skorelowana z kierunkami krystalograficznymi – stąd nazwa tego zjawiska: anizotropia magnetokrystaliczna, choć często mówi się krótko „anizotropia” lub „anizotropia krystaliczna”. Podobnie jak w przypadku oddziaływań wymiennych, anizotropia magnetokrystaliczna jest przejawem zjawisk kwantowych. Jak pisze Aharoni ([50], str. 84), "anizotropia magnetokrystaliczna jest spowodowana przez

^{*} Brown stosuje stałą $C = 2A$. Podobnie i niektórzy inni autorzy, np. Aharoni. Przyczyny takiego stanu rzeczy są wyjaśnione w pracy Browna z 1962 roku. Należy uważać na tę subtelną różnicę pomiędzy stałymi C i A , może bowiem dojść do pomyłki, jak to jest obecne w pracy Blundella, we wzorze (4.19).

oddziaływania spin-orbita. Orbitale elektronowe oddziałują z polem krystalicznym, a przez ich oddziaływanie ze spinami jonów, dla tych ostatnich korzystniej jest ustawiać się w kierunkach zgodnych z osiami krystalograficznymi". Oczywiście, charakter anizotropii zależy od geometrii siatki krystalicznej. Gdy mamy do czynienia z jedną wyróżnioną osią w próbce (jak jest w przypadku kobaltu Co-hcp), to mówimy o anizotropii jednoosiowej. Inny, często spotykany przypadek dotyczy siatek kubicznych – wtedy mamy trzy wyróżnione osie w kryształach (tak jest np. w żelazie lub w niklu). Dla anizotropii jednoosiowej prawdziwy jest wzór^{*}

$$E_{\text{aniso}} = - \int_V K \left(\mathbf{a} \cdot \frac{\mathbf{M}}{M_s} \right)^2 dV, \quad (2.6)$$

gdzie całkowanie odbywa się po całej objętości danej próbki, V . Jednostkowy wektor $\mathbf{a}$ opisuje wyróżniony kierunek anizotropii, natomiast stała K – siłę anizotropii. Znak stałej K decyduje, czy kierunek $\mathbf{a}$ jest kierunkiem łatwym ($K > 0$), czy trudnym ($K < 0$).

2.1.4 Energia odmagiesowania

$$E_d = - \frac{1}{2} \mu_0 \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_d dV, \quad (2.7)$$

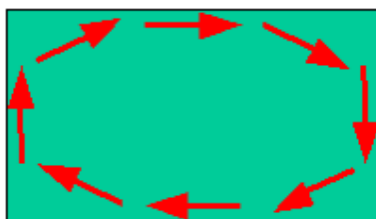
gdzie całkowanie odbywa się po całej objętości danej próbki, V .

Energia odmagiesowania (inne nazwy: magnetyczna, magnetostatyczna, energia oddziaływania dipolowego) jest przejawem klasycznego oddziaływania dipolowego. Wzór ten podaje zależność energii od pola odmagiesowania $\mathbf{H}_d$, należy jednak pamiętać że samo pole odmagiesowania jest skomplikowaną funkcją namagnesowania. Wartość pola $\mathbf{H}_d$ w danym punkcie ciała można obliczyć całkując przyczynki oddziaływania dipolowego po całym ciele. Popularne jest również podejście

^{*} Dla przypadku anizotropii jednoosiowej, stałą anizotropii zapisuje się często jako K_1 albo K_u .

energetyczne, gdzie z faktu bezwirowości tego pola (w nieobecności prądów) wynika możliwość zdefiniowania potencjału magnetostatycznego, U , jako $\mathbf{H}_d = -\nabla U$. Następnie z równań Maxwella można otrzymać zestaw warunków, które sprowadzają się do równania Poissona na U , wraz z odpowiednimi warunkami brzegowymi. Jakby nie było, pole $\mathbf{H}_d$ jest zależne od $\mathbf{M}$.

Stan o najniższej energii dwóch spinów oddziałujących dipolowo, to układ w którym są one ustawione antyrównolegle. Natomiast próbka rozciągała, aby zmniejszyć swoją energię, realizuje tzw. „zasadę unikania ładunków powierzchniowych” (ang. *pole avoidance principle*). W efekcie linie sił pola $\mathbf{H}$ „starają się nie wychodzić poza obszar ciała”, co jest schematycznie ukazane na Rys. 2-1.



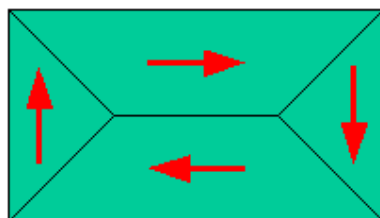
Rys. 2-1 Jeżeli uwzględniamy wyłącznie oddziaływania dipolowe, to aby zminimalizować energię ze wzoru (2.7) układ realizuje tzw. „zasadę unikania ładunków powierzchniowych”. Rysunek schematyczny, strzałki symbolizują kierunek namagnesowania.

2.1.5 Uwagi odnoszące się do oddziaływań i wzoru na energię

Warto tutaj zwrócić uwagę na kilka faktów.

♦ Istnienie domen ferromagnetycznych zostało stosunkowo późno *zaobserwowane* doświadczalnie, dopiero w XX wieku, głównie ze względu na trudności techniczne. Efekt ten nie został jednak wcześniej *przewidziany* teoretycznie, gdyż jest to trudne zjawisko, do jego występowania niezbędne jest uwzględnienie wszystkich trzech rodzajów oddziaływań (przy braku zewnętrznego pola), z których dwa mają charakter kwantowy. Na przykład, jeżeli rozważamy tylko oddziaływania dipolowe i wymienne,

to moglibyśmy w rezultacie mieć do czynienia z układem namagnesowania podobnym do przedstawionego na Rys. 2-1. Dopiero uwzględnienie również anizotropii magnetokrystalicznej doprowadzi do wyodrębnienia obszarów o lokalnie jednorodnym namagnesowaniu, czyli domen magnetycznych – patrz Rys. 2-2.



Rys. 2-2 Bez uwzględnienia oddziaływania anizotropii magnetokrystalicznej moglibyśmy mieć do czynienia z układem przedstawionym na Rys. 2-1. Dopiero uwzględnienie wszystkich oddziaływań skutkuje pojawieniem się domen. Na przedstawionym schemacie przyjęto oś poziomą jako oś łatwą. Rysunek schematyczny.

♦ Oddziaływania Zeemana i anizotropia magnetokrystaliczna są oddziaływaniami *lokalnymi*. Oddziaływania wymienne są oddziaływaniami *krótkozasięgowymi*, zaś oddziaływania dipolowe są oddziaływaniami *długozasięgowymi*. Stąd wynika, że np. wyspy ferromagnetyczne o małych rozmiarach mają strukturę jednodomenową – bo dominują w nich oddziaływania wymienne. Z drugiej strony duże ciała zbudowane z materiałów ewidentnie ferromagnetycznych (np. obuch żelaznego młotka) mają całkowite (makroskopowe) namagnesowanie równe zero, bo składają się z wielu domen przeciwnie namagnesowanych. Dzieje się tak na skutek oddziaływań dipolowych.

♦ Rozwijając ten wątek, można wprowadzić wielkości o wymiarze długości opisujące zjawiska mikromagnetyczne. Z jednej strony mamy więc tzw. długość wymiany Néela (ang. *exchange length*):

$$\lambda_{\text{nex}} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}. \quad (2.8)$$

To właśnie z tą wielkością jest związany problem „dla jak małych rozmiarów, ciała mają tendencję by być w stanie jednodomenowym”.

Z drugiej strony jest długość wymiany Blocha:

$$\lambda_{\text{bex}} = \sqrt{\frac{A}{K}}. \quad (2.9)$$

Z kolei, z tą wielkością jest powiązana grubość ścianki domenowej występującej najczęściej w ciałach objętościowych (ścianki typu Blocha).

W niniejszej pracy będę analizować próbki o małej (lub zerowej) anizotropii. Wielkość λ_{bex} nie będzie miała zatem istotnego znaczenia, np. nie będzie ona znacząco ograniczać rozmiaru siatki podziału (ust. 2.2). Dlatego będę posługiwać się tylko długością wymiany Néela i będę ją w skrócie nazywał długością wymiany i oznaczał jako λ_{ex}

$$\lambda_{\text{ex}} \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_{\text{nex}} \quad (2.10)$$

♦ W niniejszej pracy zastosowano przyjęte powszechnie nazewnictwo i podział oddziaływań na anizotropię magnetokrystaliczną, oddziaływania wymienne i dipolowe. Należy jednak pamiętać o uwagach Browna, że zaprezentowane wzory (2.4), (2.6) i (2.7) powinny być interpretowane w sposób *fenomenologiczny*. I tak na przykład wzór na anizotropię magnetokrystaliczną (2.6), zawiera w przypadku kryształu heksagonalnego nie tylko przyczynki od oddziaływania spin-orbita (anizotropowego, z siecią krystaliczną), ale także przyczynki od oddziaływania dipolowego. Szczegółowo ten problem jest omówiony w książkach Borna ([23], str. 8 i 34) i Aharoniego ([50], str. 144).

♦ Przez jednorodny ferromagnetyk, będący w centrum zainteresowania niniejszej pracy, rozumieć będziemy układ spełniający warunek $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| = M_s = \text{const.}$

2.1.6 Pole efektywne, zjawiska dynamiczne

Jeżeli analizowany przypadek dotyczy ciała znajdującego się w stanie równowagi, szukanie minimum energii (2.1) może być odpowiednim sposobem rozwiązywania problemu. Jeżeli jednak mamy do czynienia ze zjawiskami dynamicznymi, konieczne jest inne podejście i temu będzie poświęcony poniższy ustęp. Co prawda, zagadnienia te odbiegają trochę od meritum niniejszej pracy, ich opis jest jednak logicznym uzupełnieniem przedstawionej dotychczas informacji.

Lokalny moment siły, $\mathbf{L}$, przypadający na jednostkową objętość o namagnesowaniu $\mathbf{M}$, można zapisać jako ([23], ust. 1.3):

$$\mathbf{L} = \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} . \quad (2.11)$$

Powyższe równanie pozwala określić tzw. „pole efektywne”, $\mathbf{H}_{\text{eff}}$, które opisuje uogólniony wektor siły. Wielkość ta jest powiązana z gęstością energii przez jej różniczkowanie po kartezjańskich współczynnikach wektora $\mathbf{M}$.

Uwzględnienie wspomnianych dotychczas oddziaływań daje następujący wzór na całkowite pole efektywne:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{ext}} + \frac{2A}{M_s^2} (\nabla \mathbf{M})^2 + \frac{2}{\mu_0 M_s^2} K_1 (\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}) \mathbf{a} + \mathbf{H}_d , \quad (2.12)$$

gdzie w kolejności są przedstawione przyczynki do pola efektywnego pochodzące od: oddziaływań z zewnętrznym polem magnetycznym (oddziaływanie Zeemana), oddziaływań wymiennych, anizotropii jednoosiowej i odnamagnesowania.

Dynamiczna ewolucja układu może być analizowana w oparciu o równanie ruchu będące ścisłym odpowiednikiem zwykłego, mechanicznego równania ruchu, gdzie pochodna momentu pędu jest równa momentowi siły uzupełnionemu o człon tłumienia. Równanie to, zwane równaniem Landaua-Lifshitz-Gilberta [51, 52], w formie Landaua-Lifshitz-Gilberta wygląda następująco:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -|\bar{\gamma}|\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{|\bar{\gamma}|\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}), \quad (2.13)$$

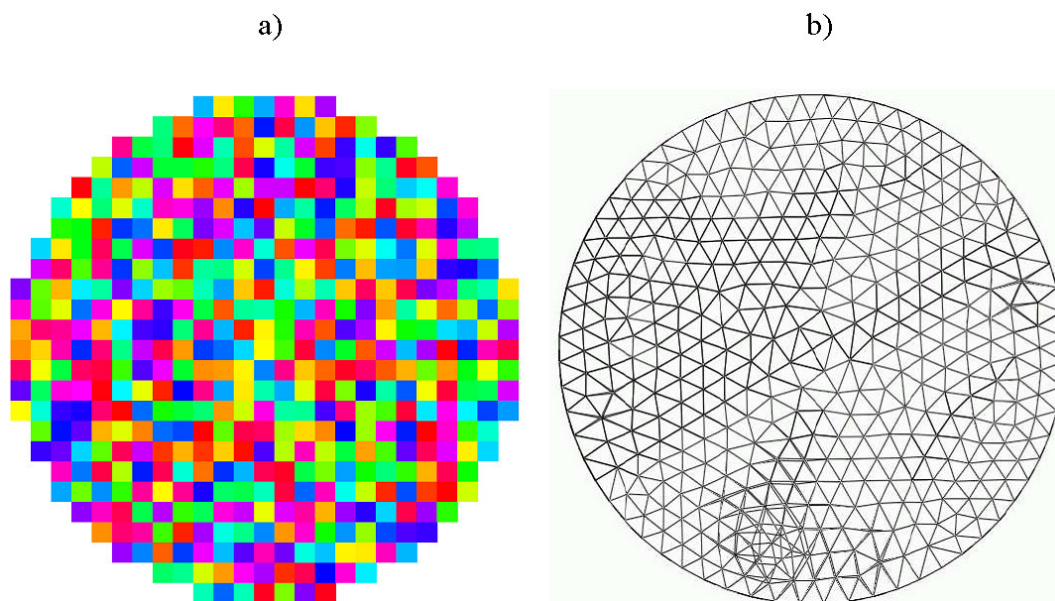
gdzie $\bar{\gamma}$ jest współczynnikiem giromagnetycznym Landaua-Lifshitz, a α jest bezwymiarowym współczynnikiem tłumienia (zwanym czasami współczynnikiem Gilberta). Pierwszy człon równania (2.13) odpowiada za precesję namagnesowania w polu efektywnym, a drugi opisuje zjawiska dysypatywne.

2.2 Mikromagnetyzm numeryczny, wprowadzenie siatki

podziału

Wiele numerycznych prac z dziedziny mikromagnetyzmu opiera się na metodzie rozwiniętej przez Browna i LaBonte, którzy analizowali jednowymiarową a później dwuwymiarową ściankę domenową [26, 27]. Podejście to polega na wprowadzeniu siatki w przestrzeni i podziale obszaru próbki na elementy zwane komórkami. Oprócz przeprowadzenia takiej procedury, tzw. dyskretyzacji przestrzeni, przyjmuje się następujące założenie: namagnesowanie w obrębie danej komórki jest stałe. (W literaturze obecne jest też inne podejście, gdzie namagnesowanie zmienia się np. liniowo w każdej komórce [53, 54]). Warto w tym momencie zwrócić uwagę na dwie klasy programów modelujących: programy oparte na metodzie różnic skończonych (FD; ang. *finite difference*) korzystają z regularnej siatki podziału, gdzie jest obecna symetria translacyjna. Z kolei programy oparte na metodzie elementów skończonych korzystają zwykle z nieregularnej siatki podziału. Zaletą tego drugiego rozwiązania jest możliwość dostosowania siatki dyskretyzacji do kształtu próbki i niejednokrotnie odtworzenie tego kształtu w sposób dużo lepszy niż w programach FD – patrz Rys. 2-3. Z kolei, zaletą programów FD jest możliwość szybkiego obliczania energii

odmagnesowania przez skorzystanie z twierdzenia o splocie, co będzie jeszcze szerzej omówione w ust. 2.5.



Rys. 2-3 Mikromagnetyzm numeryczny opiera się na wprowadzeniu siatki podziału. Dla zobrazowania procesu dyskretyzacji przedstawiam próbkę o kształcie koła z widokiem od góry na siatkę. Programy oparte na metodzie różnic skończonych korzystają z regularnych siatek, najczęściej próbka jest podzielona na komórki prostokątne – zaznaczone tutaj różnymi kolorami (a). Programy oparte na metodzie elementów skończonych korzystają z nieregularnych siatek podziału, najczęściej komórki są czworoscianami (b, rysunek zaczerpnięty z pracy doktorskiej Scholza [55]; na rysunku widzimy górną powierzchnię próbki, czworosciany są to widoczne jako trójkąty).

Bardzo ważnym parametrem siatki podziału jest rozmiar komórek. Tradycyjnym kryterium potwierdzonym w wielu pracach (np. [33]) jest wymóg, by długość najdłuższej krawędzi komórki (oznaczymy ją jako c) nie przekraczała żadnej długości wymiany, ani λ_{nex} ani λ_{bex} – patrz ust. 2.1.5. Dzięki temu, „ziarnistość” dyskretyzacji nie wpływa znacząco na rozkład namagnesowania, ciągły z założenia. Jeżeli modelowanie uwzględnia również efekty temperaturowe, to należy brać jeszcze pod uwagę tzw. termiczną długość wymiany [56]. Ewidentnie prace, w których prezentowane jest modelowanie bez podawania parametru c , należy traktować z rezerwą. Natomiast publikacje, w których powyższe kryterium jest niespełnione, prezentują niestety

niepewne wyniki. Aharoni opisuje dokładniej ten problem w swojej książce ([50] ust. 11.2). Drugim czynnikiem ograniczającym od góry rozmiar komórki^{*} dla programów typu FD jest wymaganie, by rozmiar komórki nie powodował zbyt dużej chropowatości powierzchni, co jest widoczne zwłaszcza w przypadku ciał obłych – patrz lewa strona Rys. 2-3. Niestety, w tym wypadku trudno jest podać jakiś konkretny algorytm ustalania odpowiedniego rozmiaru komórki. Często jedynym sposobem jest przeprowadzenie kontrolnych obliczeń dla komórek o rozmiarze $c/2$, co jest oczywiście czasochłonne. Ciekawą w tej sytuacji propozycją jest pomysł Donahue, by stosując „zwykłe” rozmiary komórek (powiedzmy, c) przeprowadzić wstępne obliczenia dla gęściej rozmieszczonych komórek na powierzchni (np. o rozmiarze $c/7$), obliczyć na tej podstawie „czynniki korekcyjne”[†] i w dalszej pracy korzystać już tylko z tych czynników [57].

Idea zaprezentowana w niniejszej pracy zostanie przedstawiona dla przypadku FD. Prowadzi to bowiem to prostszego opisu. Należy podkreślić, że sam zaprezentowany pomysł uwzględniania periodycznych warunków brzegowych jest ogólny i może być stosowany również w programach bazujących na siatkach nieregularnych. Objętość komórki będzie oznaczana jako V_{el} .

Dyskretyzacja przestrzeni próbki prowadzi do modyfikacji wzorów przedstawionych w ust. 2.1. Skoro obszar próbki, V , jest sumą obszarów zajmowanych przez poszczególne komórki numerowane od 1 do n , $V(1)..V(n)$, a namagnesowanie w obrębie każdej z tych

^{*} Rozmiary komórek są z reguły ograniczone od dołu przez dostępną moc obliczeniową (głównie chodzi o prędkość procesora). Mały rozmiar komórek oznacza bowiem dużą ich liczbę, czyli dużą liczbę obliczeń. Dla aktualnie dostępnych komputerów PC liczbę komórek 10^5 uznaje się za „dużą”.

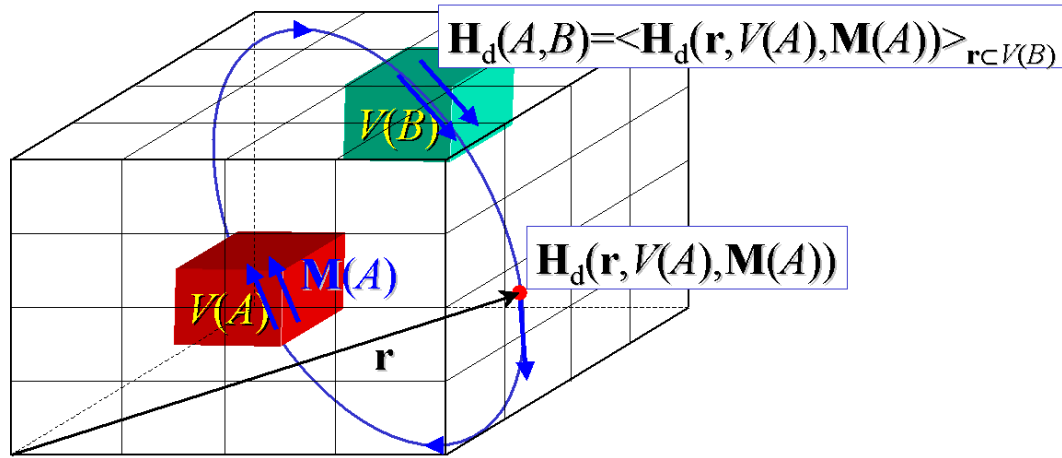
[†] Takie „czynniki korekcyjne” mają formę podobną do anizotropii, ale dotyczącej tylko komórek na powierzchni próbki.

komórek jest jednorodne, $\mathbf{M}(1)..\mathbf{M}(n)$, to całkowanie po V można zamienić na sumowanie. Zostanie to przedstawione na przykładzie oddziaływania Zeemana:

$$E_{\text{Zeeman}} = -\mu_0 \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} dV \xrightarrow{\text{dyskretyzacja}} -\mu_0 \cdot V_{\text{el}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}(i) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}(i), \quad (2.14)$$

gdzie pole zewnętrzne, będące funkcją położenia $\mathbf{H}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, zostało przybliżone przez zbiór średnich wartości, oddzielnie dla każdej komórki $\mathbf{H}_{\text{ext}}(1)..\mathbf{H}_{\text{ext}}(n)$. Widać, że w przypadku oddziaływania *lokalnego* dyskretyzacja przestrzeni próbki prowadzi do prostych zmian algebraicznych. Dla *krótkozasięgowego* oddziaływania wymiennego sytuacja jest już bardziej skomplikowana. Należy bowiem przybliżyć pochodne cząstkowe obecne w równaniu (2.4) przez różnice namagnesowania w sąsiednich komórkach. Dla komórek prostopadłościennych problem ten analizuje Donahue, który rozważa uwzględnienie np. tylko najbliższych sąsiadów, lub również następnych [58]. Proces ten prowadzi do błędów szybko malejących wraz z malejącym rozmiarem komórek. W niniejszej pracy będę korzystał z implementacji uwzględniającej tylko najbliższych sąsiadów przy liczeniu pochodnych występujących w równaniu (2.4).

Przyjrzyjmy się dokładniej wpływowi dyskretyzacji na oddziaływanie dipolowe. Zgodnie z ust. 2.1.4, pole $\mathbf{H}_d(\mathbf{r})$ w danym punkcie ciała można obliczyć całkując przyczynki oddziaływania dipolowego tak, by uwzględnić oddziaływanie ze wszystkimi punktami tego ciała. By ułatwić zrozumienie tego postępowania posłużymy się schematem przedstawionym na Rys. 2-4.



Rys. 2-4 Przyczynek do pola odmagiesowania w danym punkcie próbki, $\mathbf{r}$, pochodzący od jednorodnie namagnesowanej komórki A , jest funkcją położenia, $\mathbf{r}$, geometrii komórki (w tym i jej położenia w przestrzeni), $V(A)$, i jej namagnesowania, $\mathbf{M}(A)$, co zapisano jako $\mathbf{H}_d(\mathbf{r}, V(A), \mathbf{M}(A))$. Średnie pole odmagiesowania w komórce B pochodzące od komórki A jest oznaczone jako $\mathbf{H}_d(A, B)$.

Oznaczmy pole odmagiesowania w punkcie $\mathbf{r}$ pochodzące od komórki A jako $\mathbf{H}_d(\mathbf{r}, A) = \mathbf{H}_d(\mathbf{r}, V(A), \mathbf{M}(A))$. Zwróćmy uwagę, że nie jest konieczna znajomość pola $\mathbf{H}_d(\mathbf{r}, A)$ w dowolnym punkcie ciała. Aby obliczać energię magnetostatyczną komórki B w polu komórki A , wystarczy bowiem znajomość pola uśrednionego po przestrzeni komórki B : $\mathbf{H}_d(A, B) = \langle \mathbf{H}_d(\mathbf{r}, A) \rangle_{\mathbf{r} \in V(B)}$. Korzystając z tej definicji, energię odmagiesowania całej próbki można zapisać jako:

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_d dV \xrightarrow{\text{dyskretyzacja}} -\frac{\mu_0}{2} V_{\text{el}} \sum_B \mathbf{M}(B) \sum_A \mathbf{H}_d(A, B). \quad (2.15)$$

Logicznym uzupełnieniem przedstawionej ścieżki postępowania jest wyjaśnienie metody liczenia pola $\mathbf{H}_d(A, B)$. Będzie to pokazane w następnym ustępie pt. „Tensor odmagiesowania”. Pole efektywne (wprowadzone w ust. 2.1.6) pochodzące od oddziaływania dipolowego jest równe po prostu polu odmagiesowania. Jeżeli (średnie) pole odmagiesowania dla komórki B oznaczmy jako $\mathbf{H}_d(B)$ i analogicznie oznaczmy też pole efektywne, to

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}(B) = \mathbf{H}_d(B) = \sum_A \mathbf{H}_d(A, B). \quad (2.16)$$

Pole $\mathbf{H}_d(B)$ określa (średnie) pole odmagiesowania w obrębie komórki B . Zawiera ono przyczynki od wszystkich komórek dyskretyzacji, zawiera też oddziaływanie dipolowe komórki B samej ze sobą. Warto tu zwrócić uwagę, że w zagadnieniach numerycznych pole efektywne ma duże znaczenie nie tylko przy modelowaniu zjawisk dynamicznych równaniem Landaua-Lifshitz-Gilberta. Jak już pisałem, pole $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ jest gradientem energii, znajomość analitycznych wzorów na pole efektywne może być zatem bardzo pomocna w numerycznym szukaniu minimum energii.

Przy modelowaniu sytuacji statycznych oba podejścia (opisane w ust. 2.1.6): rozwiązywanie równania dynamicznego i szukanie minimum energii, są równie często spotykane w literaturze i dają zbliżone wyniki. Często wybiera się taką metodę, która pozwala na uzyskanie wyników w krótszym czasie. Można znaleźć publikacje, gdzie badając zjawiska statyczne korzysta się z równania dynamicznego (2.13) przyjmując zawyżony współczynnik tłumienia, α . Przy problemach dynamicznych takie przybliżenie jest już jednak niebezpieczne.

2.3 Tensor odmagiesowania

W ustępie tym zostanie omówione pojęcie tensora odmagiesowania. Jest ono naturalnym rozwinięciem wielkości często stosowanej w fizyce magnetyzmu, a określanej jako „czynnik odmagiesowania”. Pod koniec, zostanie wprowadzona definicja uogólnionego tensora odmagiesowania. W całym niniejszym ustępie rozważany jest przypadek, gdy dana próbka jest jednorodnie namagnesowana. Sytuacja taka może być spowodowana albo silnym polem zewnętrznym, albo np. dominacją efektów oddziaływania wymiennego, gdy próbka jest wystarczająco mała.

Namagnesowanie danego ciała, o *a priori* dowolnym kształcie, jest źródłem lokalnego pola magnetycznego, zwanego polem odnamagnesowania, którego natężenie oznaczamy jako $\mathbf{H}_d$. Wartości pola $\mathbf{H}_d$ w danym punkcie wewnątrz tego ciała możemy policzyć całkując przyczynki od oddziaływania dipolowego po objętości tego ciała.

Na początek rozważmy prosty przypadek, gdy ciało ma kształt elipsoidy a namagnesowanie $\mathbf{M}$ jest skierowane wzdłuż jednej z jej osi głównych. Wtedy pole $\mathbf{H}_d$ zależy w sposób liniowy od namagnesowania [1]:

$$\mathbf{H}_d = -N\mathbf{M}. \quad (2.17)$$

Skalar N jest nazywany *czynnikiem odnamagnesowania* (inne, często stosowane oznaczenie, to D). Bardziej skomplikowana sytuacja występuje, gdy kierunek namagnesowania nie pokrywa się z żadną z osi głównych elipsoidy. Wtedy zależność pomiędzy powyższymi wielkościami jest już tensorowa [1]:

$$\mathbf{H}_d = -N\mathbf{M} \quad (2.18)$$

Tym razem N nie jest już skalarem i wielkość tę nazywamy tensorem odnamagnesowania.

Ma on następujące własności:

- Jeżeli osie główne elipsoidy pokrywają się z układem współrzędnych xyz , to jedyne nie znikające elementy tego tensora to elementy diagonalne.
- Jego ślad jest równy jedności.
- Tensor N jest symetryczny, czyli $N_{\alpha\beta} = N_{\beta\alpha}$.
- Elementy diagonalne $N_{\alpha\alpha}$ są większe od zera.

Z wyjątkiem pierwszej cechy, reszta wymienionych własności jest zupełnie ogólna, prawdziwa też dla ciał o dowolnym kształcie [59-61]. Tensor odnamagnesowania najłatwiej jest badać definiując potencjał magnetyczny – podobnie, jak przy analizie pola odnamagnesowania $\mathbf{H}_d$ (ust. 2.1.4). Wartości elementów tensora N dla szczególnych przypadków elipsoid, takich jak kula, nieskończony pręt lub płaszczyzna, są podawane w podręcznikach, patrz np. [1]. Stablicowane wartości tych wielkości dla innych

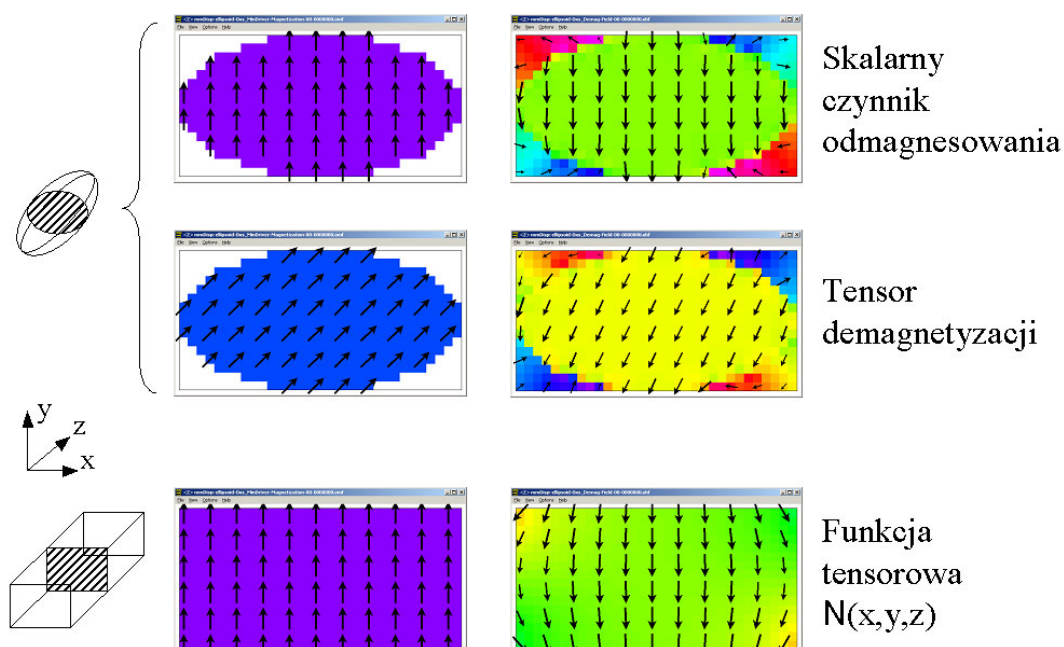
elipsoid możemy znaleźć w pracy Osborna [62]. Tensor odmagnesowania często służy do obliczenia energii układu związanej z oddziaływaniami dipolowymi wewnątrz próbki. Energia ta dla całej elipsoidalnej próbki o objętości V jest formą kwadratową $\mathbf{M}$:

$$E_d = \frac{1}{2} V \mu_0 \mathbf{M} \cdot (\mathbf{N} \mathbf{M}) \quad (2.19)$$

Widać, że jeśli $\mathbf{N}$ nie jest tensorem diagonalnym o własnościach $N_{xx} = N_{yy} = N_{zz}$, to wypisana wyżej energia jest anizotropową funkcją wektora namagnesowania. Inaczej mówiąc, istnieją pewne preferowane kierunki jednorodnego namagnesowania ciała. Taką sytuację wielu autorów określa jako „anizotropię kształtu”, choć warto podkreślić po pierwsze, że jest to zupełnie inne zjawisko niż anizotropia magnetokrystaliczna przedstawiona w ust. 2.1.3. Po drugie, anizotropia kształtu nie jest żadnym dodatkowym oddziaływaniem które trzeba uwzględniać, wynika ona po prostu z analizy oddziaływań dipolowych.

Jeżeli chcielibyśmy rozważać ciało o *dowolnym kształcie*, pojawi się wtedy następujący problem. Mianowicie, w ogólnym przypadku, pole odmagnesowania nie musi być wielkością stałą (w obrębie rozważanej próbki). Jest to przedstawione na Rys. 2-5, gdzie pole $\mathbf{H}_d$ (prawa część rysunku) jest numerycznie obliczone dla trzech przypadków (za każdym razem próbka jest namagnesowana jednorodnie):

- Próbka elipsoidalna namagnesowana w kierunku jednej z jej osi głównych. Pole $\mathbf{H}_d$ jest skierowane przeciwnie do $\mathbf{M}$, jego wartość można powiązać z namagnesowaniem skalarnym czynnikiem.
- Próbka elipsoidalna namagnesowana w kierunku nie pokrywającym się z żadną z jej osi głównych. Pole $\mathbf{H}_d$ jest nadal jednorodne, ale ma inny kierunek niż $\mathbf{M}$. Jego wartość można powiązać z namagnesowaniem poprzez tensor $\mathbf{N}$.
- Próbka prostopadłościenna. Jak widać, pole $\mathbf{H}_d$ nie jest jednorodne wewnątrz próbki.



Rys. 2-5 Namagnesowanie (lewa strona) i pole odmagnesowania (prawa strona; patrz uwaga poniżej). Obliczenia numeryczne dla trzech przypadków: elipsoidalnej próbki i namagnesowania wzdłuż jednej z jej osi głównych (góra), elipsoidalnej próbki i namagnesowania w kierunku [110] (środek), oraz prostokątnej próbki namagnesowanej w kierunku [010] (dół). Próbki mają wymiary zewnętrzne pozostające w proporcji (x:y:z) 2:1:4. Prezentowane są przekroje przez środek każdej próbki, co jest schematycznie zaznaczone po lewej stronie. Analiza numeryczna wymagała podziału przestrzeni każdej próbki na komórki. Dla próbek elipsoidalnych zauważalne są drobne efekty związane z „chropowatością” siatki podziału na powierzchni próbki.

Uwaga: pole $\mathbf{H}_d$ zostało policzone też na zewnątrz próbek elipsoidalnych.

Dla próbek o dowolnym kształcie trzeba zatem stosować tensor odmagnesowania, który jest funkcją położenia, wprowadzony po raz pierwszy przez Schlomanna [60]. Za pomocą takiej funkcji tensorowej zapiszemy:

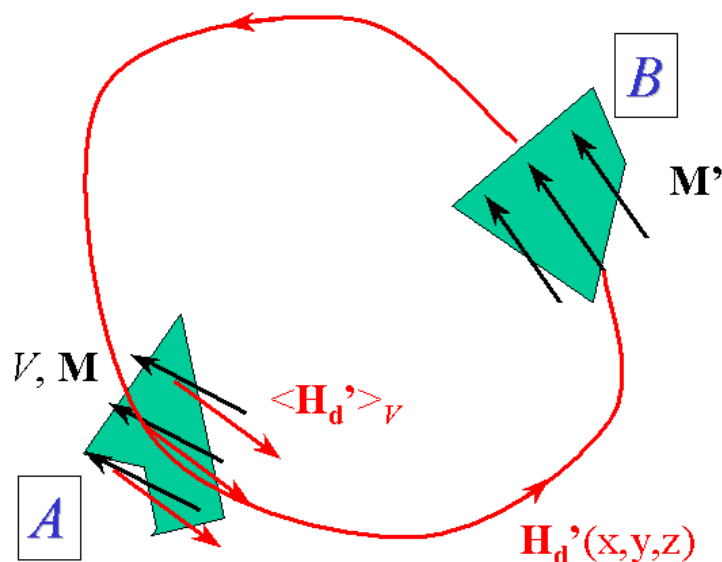
$$\mathbf{H}_d(x, y, z) = -\mathbf{N}(x, y, z)\mathbf{M}. \quad (2.20)$$

Tak wprowadzony tensor ma szereg cech wymienionych na początku tego ustępu, przy okazji omawiania próbek elipsoidalnych. Pojęcie tensora można dalej rozwijać wprowadzając uśredniony tensor, będący efektem całkowania po objętości próbki [59, 61].

Definicję tensora odmagiesowania można dalej rozszerzyć, by wykorzystać go do opisu oddziaływań dipolowych nie tylko wewnątrz danej próbki, ale też pomiędzy dwoma jednorodnie namagnesowanymi ciałami. Po pierwsze, ponieważ rozumowanie nasze będziemy stosować do obiektów małych (komórek), dla każdej komórki będziemy stosować uśredniony po jej objętości tensor. (Będzie on nadal miał trzy współrzędne opisujące położenie, ale tym razem będzie to położenie względne dwóch rozważanych obiektów). Otóż jeżeli zamiast pola $\mathbf{H}_d$, które jak widzieliśmy może być wewnątrz próbki o objętości V niejednorodne, będziemy stosować jednorodne, uśrednione po objętości pole $\langle \mathbf{H}_d \rangle_V$, to można zdefiniować tensor $\mathbf{N}$ taki, że równania (2.19) i (2.20) będą nadal spełnione [59, 63]. Jeżeli chcielibyśmy wyrazić energię oddziaływania dipolowego przypadającą na ciało A o objętości V i namagnesowaniu $\mathbf{M}$ będące w niejednorodnym polu $\mathbf{H}_d$ ciała B o namagnesowaniu $\mathbf{M}'$, to możemy ją zapisać jako:

$$E_d = \frac{1}{2} V \mu_0 \mathbf{M} \cdot (\mathbf{N}(\mathbf{r}(A,B)) \mathbf{M}'), \quad (2.21)$$

gdzie $\mathbf{N}(\mathbf{r})$ to jest tzw. uogólniony tensor odmagiesowania [63]. Opisuje on oddziaływanie dipolowe pomiędzy dwoma ciałami. Zależy on od kształtu obu ciał, ich wzajemnego położenia $\mathbf{r}(A,B)$ i ich wzajemnej orientacji w przestrzeni. Przyjmijmy, że wektor $\mathbf{r}(A,B)$ łączy środki ciężkości obu ciał A i B . Powyższe rozumowanie zostało schematycznie przedstawione na Rys. 2-6.



Rys. 2-6 Schemat dwóch oddziałujących ze sobą dipolowo ciał.

Ciało B , o jednorodnym namagnesowaniu $\mathbf{M}'$, wytwarza naokoło siebie pole $\mathbf{H}_d'$, zaznaczone schematycznie na rysunku ciągłą czerwoną linią. Pole $\mathbf{H}_d'$ w obszarze ciała A może zostać przybliżone wartością uśrednioną $\langle \mathbf{H}_d' \rangle_V$. Znając tę wielkość można podać tensor odmagnesowania, $\mathbf{N}$. Przy takim wyborze metody uśredniania wzór na energię ciała A w polu ciała B przyjmie dokładnie formę (2.21).

Uogólniony tensor odmagnesowania, dla przypadku oddziałujących prostopadłościanów, jest opisany w pracach [63-66]: Schabes opisuje oddziaływanie pomiędzy jednakowymi sześciąciami [64], Newell [63] oraz Fukushima [66] opisują oddziaływania pomiędzy jednakowymi prostopadłościanami, natomiast Maicus opisuje oddziaływania pomiędzy różnymi prostopadłościanami [65]. Zgodnie z uwagami zawartymi jednak w oprogramowaniu OOMMF [28], wzory końcowe z prac [64] i [65] zawierają błędy. Dlatego w niniejszej pracy będę się opierać na pracy [63].

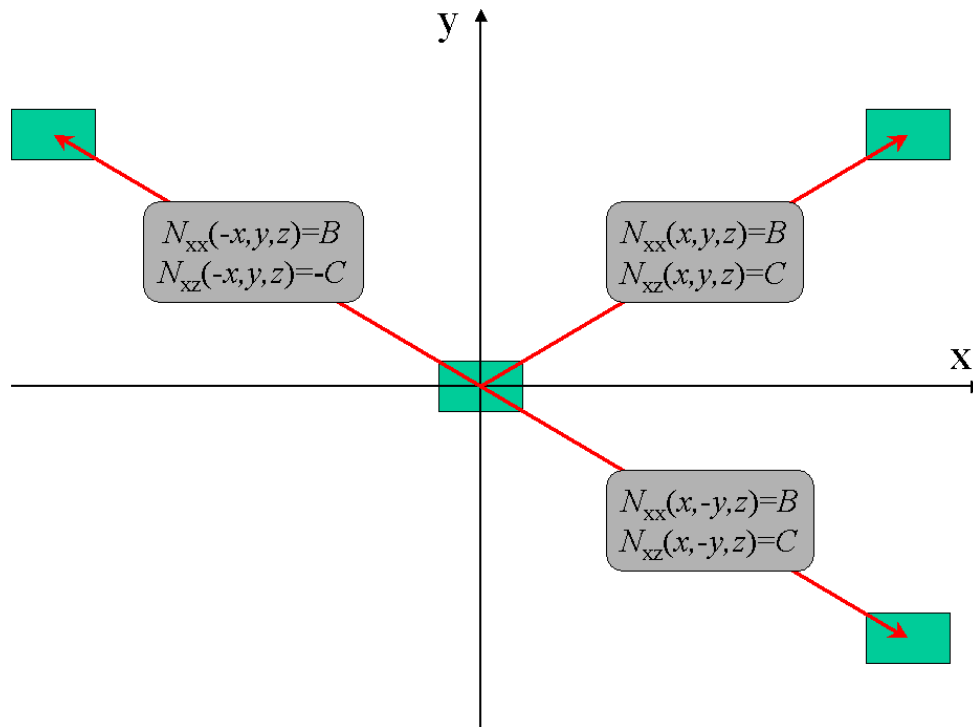
Na koniec, korzystając z pracy [63], warto podsumować własności uogólnionego tensora odmagnesowania, $\mathbf{N}$, dla oddziaływania pomiędzy ciałami A i B :

- Jeżeli ciała się nie przekrywają, wtedy $\text{Tr}(\mathbf{N}) = 0$. Jeżeli, z drugiej strony, A i B opisują jedno i to samo ciało, mamy do czynienia z „książkowym” przypadkiem i wtedy ślad wynosi jeden.
- Tensor $\mathbf{N}$ jest symetryczny.

- Tensor N jest bezwymiarowy i nie zmienia się, gdy wszystkie wymiary i odległości są przeskalowane o ten sam czynnik.
- Poniższa, przydatna własność jest spełniona dla oddziaływania pomiędzy jednakowymi prostopadłościanami [63]:

Jeżeli wektor wzajemnego położenia łączący środki ciężkości prostopadłościanów A i B , oznaczmy jako $\mathbf{r}=(x,y,z)$, to diagonalne elementy tensora $N_{xx}(\mathbf{r})$, $N_{yy}(\mathbf{r})$ i $N_{zz}(\mathbf{r})$ są parzystą funkcją każdej ze składowych wektora $\mathbf{r}$. Z kolei elementy pozadiagonalne $N_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ ($\alpha \neq \beta$) są odpowiednio parzystą lub nieparzystą funkcją. I tak, na przykład, $N_{xz}(\mathbf{r})$ jest parzystą funkcją składowej y , natomiast nieparzystą funkcją składowych x i z . Jest to zobrazowane na Rys. 2-7.

- Jeżeli wymiary ciał A i B są pomijalne w stosunku do odległości pomiędzy nimi, to można stosować przybliżenie dipoli punktowych. Odpowiednie wzory na tensor dla tego przypadku można znaleźć w pracy [63].



Rys. 2-7 Tensor od magnesowania dla oddziaływania dipolowego pomiędzy ciałami (zielone prostokąty) jest funkcją wektora wzajemnego położenia tych ciał, $\mathbf{r}$, zaznaczonego na czerwono. Jeżeli rozważane ciała są jednakowymi prostopadłościanami, to elementy tensora $N_{\alpha\beta}$ są parzystą lub nieparzystą funkcją składowych wektora $\mathbf{r}$. Na rysunku pokazano zależność elementów N_{xx} i N_{xz} . Rysunek schematyczny.

2.4 Periodyczne warunki brzegowe w mikromagnetyzmie

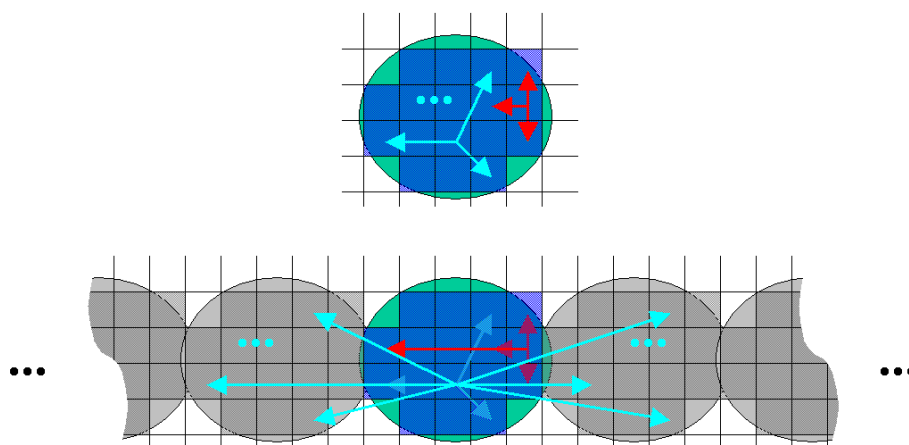
Periodyczne warunki brzegowe (PBC, ang. *periodic boundary conditions*; zwane też warunkami Borna-von Karmana) zostały po raz pierwszy zastosowane w 1923 roku przez Borna do opisu drgań sieci krystalicznej [37, 38]*. PBC mają zastosowanie nie tylko w fizyce ciała stałego, lecz też na przykład w opisie dynamiki molekularnej, gdzie analizując nieskończony ośrodek cząsteczek gazu lub cieczy rozważa się pudło do którego stosuje się właśnie PBC. W przypadku fizyki ciała stałego PBC najczęściej bywają stosowane by móc zdefiniować operację translacji na siatce krystalicznej dla skończonej próbki. W efekcie możliwa jest np. analiza drgań termicznych sieci (fononów), czy też funkcji falowej elektronu kwaziswobodnego. Historycznie rzecz biorąc, rozważając drgania sieci krystalicznej Born zaproponował, by „uwzględnić duży, sześcienny fragment ciała o objętości V i narzucić warunki brzegowe takie, że odpowiednie punkty na przeciwległych ścianach sześcianu poruszają się w dokładnie taki sam sposób” [38]. Dla nas chyba bardziej ciekawy jest fragment pracy z roku 1923, gdzie jest modelowany obszar o n^3 komórkach: „każde dwie komórki ciała, których indeksy l_x, l_y, l_z są przystające modulo n , są w pełni równoważne; ich wychylenia, u_k , są więc równe: $u_k(l_x+n, l_y, l_z) = u_k(l_x, l_y+n, l_z) = u_k(l_x, l_y, l_z+n) = u_k(l_x, l_y, l_z)$ ” [37]. Periodyczne warunki brzegowe rozumiemy zatem jako i) zdefiniowanie obszaru modelowania wygodnego do powielania go i wypełniania w ten sposób przestrzeni (np. pudła prostopadłościennego), oraz ii) wprowadzenie warunku, że we wszystkich powtórzeniach wybranego obszaru rozważane zjawiska zachodzą jednakowo. Takie powtórzenia nazywamy „obrazami”. Widać zatem, że PBC nie muszą być ściśle powiązane z istnieniem symetrii translacji (np. siatki krystalicznej) i taka też będzie

* W pracy z 1956 roku Born chyba niepoprawnie cytuje swoją pracę z 1923 roku, periodyczne warunki brzegowe są w niej bowiem wprowadzone nie na stronie 557, lecz na stronie 587.

sytuacja rozważana w niniejszej pracy – w odróżnieniu od typowego zastosowania PBC w fizyce ciała stałego.

W zależności od potrzeb mówi się o periodycznych warunkach brzegowych tylko w jednym wymiarze (1D PBC), tylko w dwóch wymiarach, lub we wszystkich trzech wymiarach. Warto zwrócić uwagę na intencje towarzyszące Bornowi przy wprowadzaniu tych warunków. Píše on że, „jeżeli próbka jest wystarczająco duża”, to rozwiązania „praktycznie nie zależą od kształtu próbki lub konkretnych, narzuconych warunków brzegowych” [38]. *PBC służą zatem do opisu zjawisk zachodzących we wnętrzu, przy zaniedbaniu wpływu powierzchni na te zjawiska.* Warto też zwrócić uwagę na inne znaczenie warunku żeby „próbka była wystarczająco duża”. Chodzi o uniknięcie sytuacji, gdy narzucenie PBC wprowadzi do rozpatrywanego układu nieistniejącą w rzeczywistości periodyczność. Jeżeli modelowany obszar będzie wystarczająco duży, to zjawisko takie będzie miało znikome znaczenie.

W oddziaływaniach rozpatrywanych w mikromagnetyzmie, narzucenie periodycznych warunków brzegowych w analizie numerycznej prowadzi do konieczności uwzględnienia następujących zjawisk, przedstawionych schematycznie na Rys. 2-8.



Rys. 2-8 Wpływ okresowych warunków brzegowych (PBC) na oddziaływania dipolowe i wymienne (strzałki odpowiednio seledynowe i czerwone). Rysunek schematyczny. Góra rysunku: brak PBC. Dół rysunku: PBC narzucone na jeden wymiar, w kierunku poziomym.

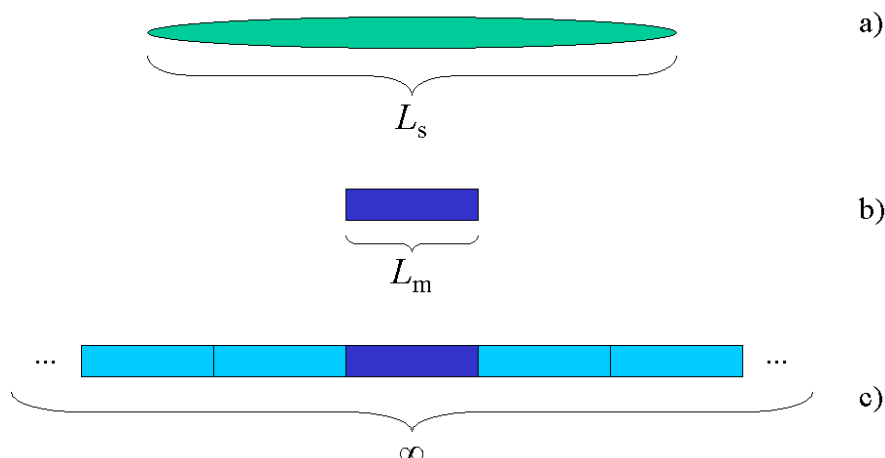
Bez okresowych warunków brzegowych (góra rysunku), trzeba w oddziaływaniach dipolowych uwzględniać interakcję ze wszystkimi komórkami ciała, a w oddziaływaniach wymiennych tylko z sąsiednimi komórkami*. Skutki narzucenia PBC są pokazane w dolnej części rysunku. Dla oddziaływania wymiennego, dla komórek będących na powierzchni próbki[†], należy dodatkowo uwzględnić oddziaływanie z ich sąsiednimi komórkami z sąsiednich obrazów. Natomiast dla oddziaływania dipolowego należy dla wszystkich komórek uwzględnić dodatkowo oddziaływanie ze wszystkimi komórkami ze wszystkich obrazów (których jest nieskończenie wiele). Widzimy więc, że wprowadzenie PBC w niewielki sposób zmienia rachowanie oddziaływań wymiennych. Liczba dodatkowych obliczeń jest rzędu liczby komórek na powierzchni. Natomiast narzucenie PBC w oddziaływaniach dipolowych wymaga bardziej skomplikowanego postępowania, trzeba bowiem uwzględnić nieskończony zbiór komórek ze wszystkich obrazów.

* Jest to trochę uproszczony obraz. Implementacje oddziaływań wymiennych mogą uwzględniać nie tylko sąsiednie komórki, patrz ust. 2.1.2.

[†] Dotyczy to tylko powierzchni powiązanych ze stosowaniem okresowych warunków brzegowych.

2.4.1 PBC w jednym wymiarze a długość próbki

Chciałbym zwrócić tu uwagę na kłopotliwy aspekt modelowania przy użyciu periodycznych warunków brzegowych w jednym wymiarze dotyczący nazewnictwa. Załóżmy, że chcemy modelować podłużną próbkę o długości L_s . W tym celu korzystamy z periodycznych warunków brzegowych przyjmując dany obszar modelowania o długości* L_m . W rezultacie, z *definicji* PBC, modelowana struktura ma nieskończoną długość, patrz Rys. 2-9.



Rys. 2-9 Różne aspekty pojęcia „długość” przy korzystaniu z periodycznych warunków brzegowych w jednym wymiarze. Podłużna próbka ma długości L_s (a). Obszar modelowania ma długość L_m (b). Zgodnie z definicją periodycznych warunków brzegowych, modelowana struktura ma *de facto* nieskończoną długość (c). Rysunek schematyczny.

Jak można się łatwo domyślić, $L_m < L_s$ – wszak gdybyśmy mogli modelować całą próbkę to nie byłoby konieczne korzystanie z PBC. Widać więc, że w takich wypadkach mamy do czynienia z trzema, często różnymi długościami: długością próbki, długością

* Obszar ten jest dalej w procesie dyskretyzacji podzielony na komórki.

obszaru modelowania i nieskończoną długością modelowanej struktury^{*}. W praktyce długość próbki, L_s , jest często zadana z góry[†]. Natomiast kwestią otwartą i mającą istotne konsekwencje, jest decyzja jaką wybrać w modelowaniu długość L_m . Wielkość ta będzie w niniejszej pracy określana jako długość modelowania.

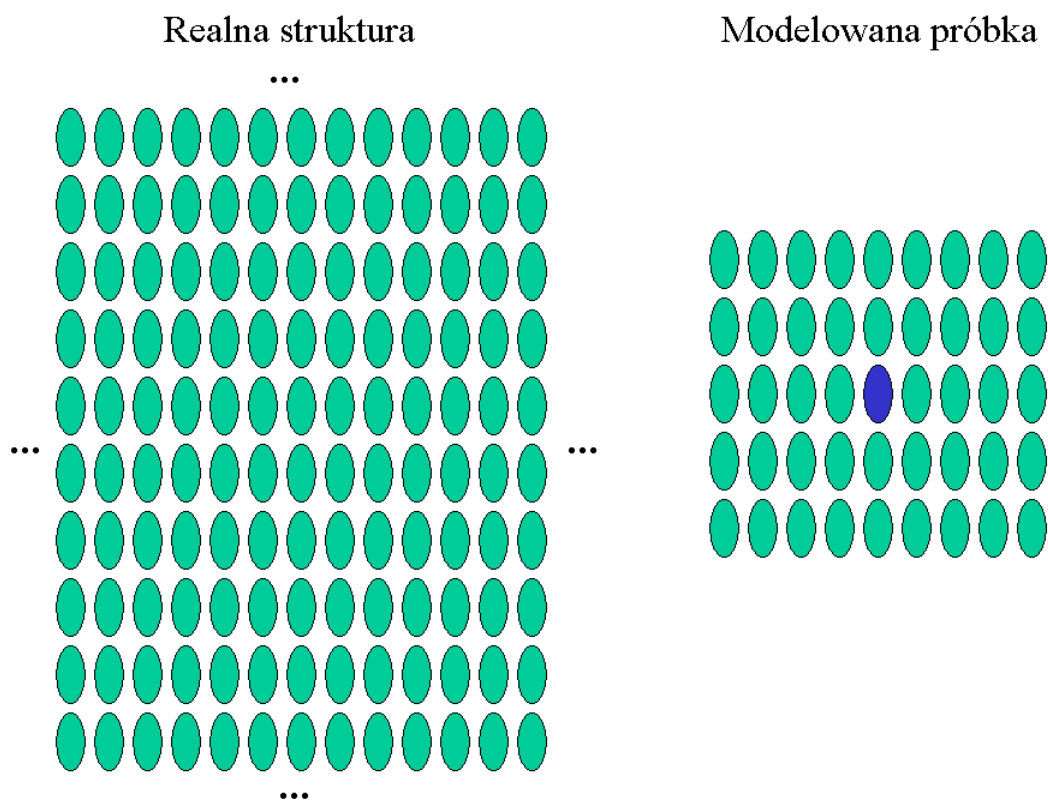
2.4.2 Warunki stosowania, konsekwencje

Problem stosowania PBC w mikromagnetyzmie wydaje się budzić kontrowersje. Zastanówmy się zatem w jakich sytuacjach można stosować periodyczne warunki brzegowe w modelowaniu mikromagnetycznym i jak wpływają one na otrzymane rezultaty. Jak już wspomniałem we wstępie, w modelowaniu możemy mieć do czynienia z przypadkami, gdy rozmiar modelowanej struktury przekracza pojemność pamięci dostępnych komputerów – stąd zapewne biorą się przypadki stosowania zbyt rzadkiej siatki podziału, spotykane czasami w literaturze, a opisane przez Aharoniego ([50], str. 246). W tej sytuacji, często jedynym wyjściem jest ograniczyć przestrzeń modelowania do pewnej części modelowanej struktury.

Poniżej posłużę się jednym konkretnym przykładem, gdzie Fidler modeluje procesy magnesowania wysp ferromagnetycznych zachodzące w dysku twardym [67]. Autor rozważa obszar rzędu jednego mikrometra kwadratowego, koncentrując uwagę na centralnej wyspie [68] – patrz Rys. 2-10. Inne uwzględnione wyspy *symulują* wpływ *całego dysku* na zachowanie badanej, centralnej wyspy. Ale przecież rozmiar planarny jednego krążka w realnym dysku to są dziesiątki centymetrów kwadratowych!

^{*} Gdybyśmy chcieli mieć skończoną długość modelowanej struktury, trzeba by zrezygnować z periodycznych warunków brzegowych w postaci Born-a von Karmana.

[†] Długość próbki, L_s , może być nieskończona. Jest tak np. w wypadku analitycznej teorii nieskończonego drutu.

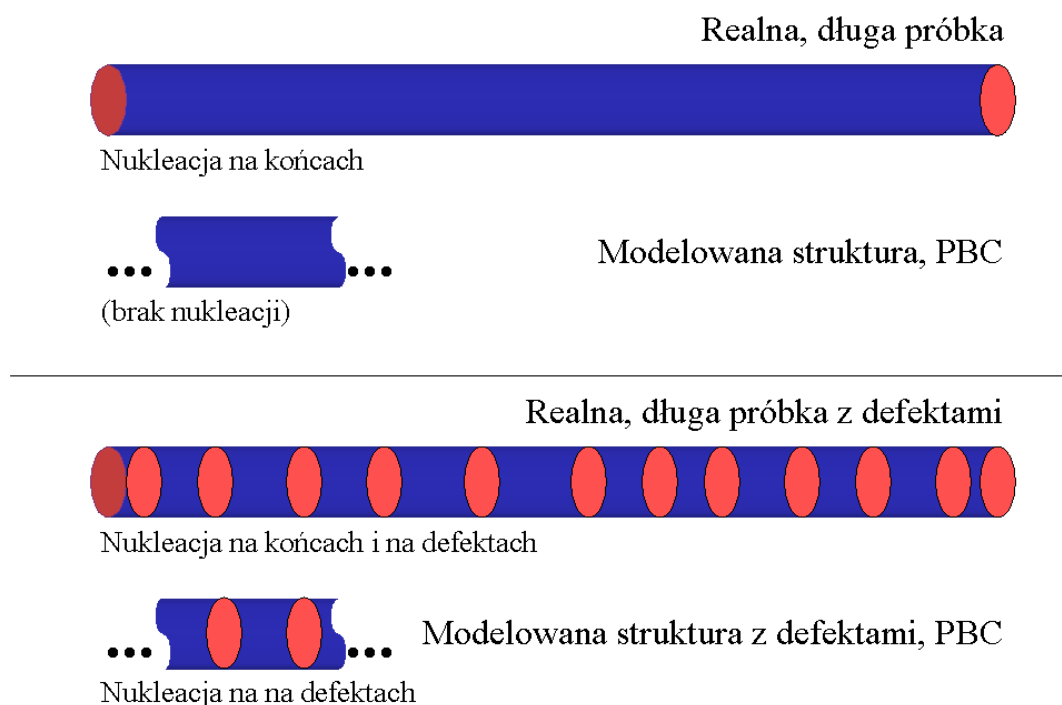


Rys. 2-10 Porównanie realnej dużej struktury, *fragment* której jest pokazany po lewej stronie rysunku, z modelowanym przez Fidlera obszarem [67], przedstawionym po prawej stronie. Zielone elipsy symbolizują wyspy ferromagnetyczne, które są położone blisko siebie i ich wzajemne oddziaływanie jest badane. Fidler wybrał do modelowania mały obszar struktury i bada wpływ rozważanej grupy wysp na centralną wyspę (zaznaczoną na niebiesko). Wpływ reszty wysp jest *zaniedbany*.

Fidler w swoich badaniach zastosował otwarte warunki brzegowe, czyli przyjął że poza obszarem modelowanej struktury nie ma żadnych obiektów. Zasadność tego przybliżenia jest wątpliwa: oddziaływania dipolowe są długozasięgowe a wprowadzone uproszczenie sprowadza się poniekąd do obcięcia ich zasięgu. Trudno jest powiedzieć, czy w konsekwencji takie modelowanie dobrze opisuje rzeczywistość. Na pewno zależy to od rozmiaru rozważanego obszaru (prawa część Rys. 2-10). Moim zdaniem, zastosowanie w tym wypadku okresowych warunków brzegowych byłoby dużo bardziej uzasadnione. Jeżeli bowiem realna próbka, która przekracza dostępny w modelowaniu mikromagnetycznym obszar, ma okresowy (lub rozciągły) charakter, okresowe warunki brzegowe są ważną alternatywą wobec otwartych warunków

brzegowych. Jeżeli jednak, geometria próbki poza modelowanym obszarem jest istotnie różna od struktury uwzględnionej w modelowanym obszarze, należy zamiast tego rozważać stosowanie otwartych warunków brzegowych. Możliwe jest też trzecie rozwiązanie: ze wstępu wiadomo, że zarówno otwarte, jak i okresowe warunki brzegowe są przybliżeniem. W przypadkach budzących wątpliwości można porównać wyniki modelowania przy zastosowaniu tych dwóch różnych technik. Jeżeli te wyniki będą podobne, jest to pewne potwierdzenie, że poprawnie opisujemy rzeczywistość.

Rozważmy teraz bardziej szczegółowo konsekwencje stosowania PBC. Najistotniejszą chyba, z punktu widzenia magnetyzmu, jest kwestia zaniedbywania efektów brzegowych. Otóż powierzchnia ferromagnetyka jest miejscem występowania skomplikowanych zjawisk, tam na przykład powstają domeny klinowe, domeny zamykające, etc. Często też powierzchnia jest miejscem nukleacji, czyli powstawania nowych domen. Przy zaniedbaniu istnienia defektów, może się zdarzyć że nukleacja zachodzi tylko na powierzchni próbki ([50], ust. 9.5.1). Zaniedbanie istnienia powierzchni może w rezultacie prowadzić do nieuwzględnienia faktu powstania jakiejś domeny, czyli potencjalnie procesu inicjującego *przemagnesowywanie całej próbki*. Zatem, modelując długi ferromagnetyczny nanodrut i stosując PBC (górna część Rys. 2-11) możemy uzyskać rezultaty niezgodne z rzeczywistością (brak nukleacji *versus* nukleacja). Często jednak realna próbka zawiera jakieś zanieczyszczenia/defekty będące dodatkowymi centrami nukleacji, oprócz końców próbki. Jeżeli odpowiednio uwzględnimy takie centra w modelowaniu, to jego rezultaty będą wtedy dużo bliższe rzeczywistości – dolna część Rys. 2-11.



Rys. 2-11 Stosowanie okresowych warunków brzegowych przy modelowaniu kwaziejednowymiarowych struktur może prowadzić do błędnych wyników (brak nukleacji), patrz górna część rysunku. Jeżeli zarówno w realnej próbce jak i w stosowanym modelu mamy defekty będące centrami nukleacji (centra nukleacji są zaznaczone na czerwono), to modelowanie może dawać wyniki zgodne z rzeczywistością – dolna część rysunku.

Warto jeszcze zwrócić uwagę, że istotna rola zjawisk powierzchniowych w mikromagnetyzmie oznacza nie tylko problemy ze stosowaniem okresowych, ale i otwartych warunków brzegowych. Te ostatnie, bowiem wprowadzają do modelowania powierzchnię, której w rzeczywistości nie ma (Rys. 1-1).

Drugą istotną konsekwencją stosowania okresowych warunków brzegowych jest sztuczne wprowadzenie okresowości, nieobecnej w realnej strukturze. Np. modelując długi nanodrut, przy narzuceniu PBC i długości modelowania L , zaniedbujemy wszelkie zjawiska (np. fluktuacje namagnesowania) o okresie większym niż L . Ten problem dotyczy nie tylko okresowych, ale i w pewnym sensie otwartych warunków brzegowych. Za każdym razem, gdy nasz obszar modelowania jest mniejszy niż realna próbka wprowadzamy milcząco sztuczną okresowość. Jedynym wyjściem z tej

sytuacji jest spełnienie warunku z przytoczonej już pracy Borna, aby „próbka (czytaj: obszar modelowania) była wystarczająco duża”. Mianowicie wprowadzona sztucznie do układu periodyczność L musi być dużo większa od rozmiaru zjawisk, z którymi mamy do czynienia, np. od rozmiaru domen ferromagnetycznych. Z drugiej strony, w analizach teoretycznych, z powodu skomplikowanej natury zjawisk magnetycznych, często z góry zakłada się pewną formę rozwiązań, np. pewien kształt i rozmieszczenie domen magnetycznych. Potem sprawdza się, jaki dokładnie rozmiar tych domen jest najbardziej korzystny. W tym świetle, analogia do narzucenia periodycznych warunków brzegowych i badania, jaka długość modelowania minimalizuje energię, jest oczywista.

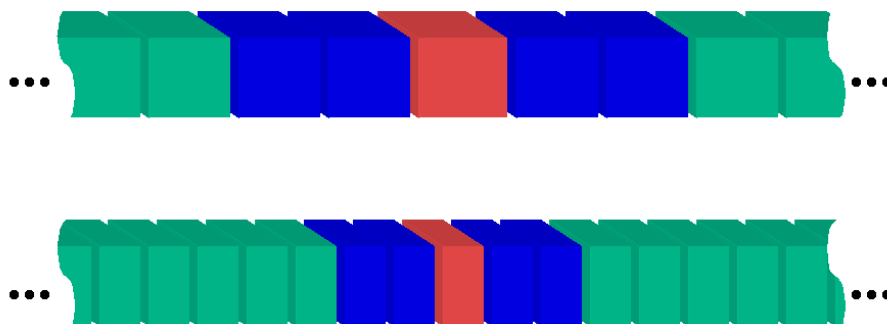
Podsumowując:

Przy stosowaniu periodycznych warunków brzegowych zaniedbywane są efekty powierzchniowe, które mogą być istotne w mikromagnetyzmie. Obszar modelowania musi być dużo większy od spodziewanych zjawisk, np. od rozmiaru domen ferromagnetycznych.

2.4.3 Przegląd literatury

Jak już wspomniałem, długozasięgowy charakter oddziaływań dipolowych jest przyczyną problemów przy próbach stosowania periodycznych warunków brzegowych w mikromagnetyzmie. Historycznie najstarsze i najprostsze rozwiązanie pochodzi od Zhu, który uwzględniał oddziaływanie tylko z 198 najbliższymi sąsiadami danej komórki (w dwóch wymiarach) [69]. Chociaż jest to proste rozwiązanie, przyjrzyjmy się mu bliżej, z powodów które podam za chwilę. Pierwszą jego wadą jest brak konkretnego uzasadnienia, dlaczego wybrano akurat 198 komórek, a nie jakąś inną ich liczbę. Drugi problem dotyczy większości przypadków stosowania PBC we współczesnych badaniach mikromagnetycznych. Otóż często autorzy programów modelujących uwzględniają w analizowaniu oddziaływań dipolowych tylko pewną, z

góry ustaloną liczbę sąsiednich obrazów PBC – oddziaływanie z pozostałymi obrazami jest zaniedbywane [70]. Znowu, liczba uwzględnionych obrazów jest słabo (jeżeli w ogóle) uzasadniona. Aby zrozumieć niebezpieczeństwo wiążące się z takim podejściem spójrzmy na Rys. 2-12.



Rys. 2-12 Modelowanie nieskończonej struktury przy pomocy PBC, przy uwzględnieniu tylko dwóch najbliższych obrazów. Oba przypadki różnią się rozmiarem obszaru modelowania (kolor czerwony).

Na rysunku tym jest przedstawione schematycznie modelowanie pewnej nieskończonej (w jednym wymiarze) struktury za pomocą PBC, gdzie uwzględniamy tylko obecność dwóch sąsiednich obrazów. W obu analizach wybrano jednak inną długość modelowania. Rezultaty obu tych procesów są zaburzone założeniem obcięcia zasięgu oddziaływania, przy czym promień tego obcięcia w każdym z tych przypadków jest różny. Prowadzi to choćby do problemu z porównaniem rezultatów takich operacji. Jest to dodatkowo o tyle niebezpieczne, że jeżeli dokumentacja używanego programu modelującego jest niedokładna, użytkownik może w ogóle nie zdawać sobie sprawy z faktu nieuwzględniania nieskończonego charakteru oddziaływań dipolowych.

W literaturze można spotkać kilka bardziej zaawansowanych propozycji rozwiązania problemu periodycznych warunków brzegowych dla oddziaływań dipolowych. I tak, Vos uwzględnia w sposób *dokładny* oddziaływanie tylko na krótkich dystansach, analizując około 100 elipsoidalnych cząstek (które są jednorodnie namagnesowane, można je zatem porównać do komórek dyskretyzacji), wpływ reszty cząstek opisując polem średnim [39]. Wybór rozmiaru obszaru poddanego *dokładnej* analizie nie jest

głęboko uzasadniony [71]. Inne podejście proponuje Mansuripur, operując składowymi Fourierowskimi namagnesowania i pola odnamagnesowania w przestrzeni odwrotnej [72]. Podejście to zostało dalej rozwinięte przez Berkova [40, 73]. Analizuje on ograniczone Fourierowskie spektrum pola $\mathbf{H}_d$ i wynikające z tego ograniczenia błędy objawiające się jako sztuczne „oscylacje” tego pola. Aby tego uniknąć proponuje on konstrukcję podobną do obliczania sum sieciowych metodą Ewalda: do rozkładu dyskretnych ładunków magnetycznych jest dodawany i odejmowany rozkład o charakterze Gaussowskim. Warto dodać, że kryterium doboru szerokości tego rozkładu nie jest zbyt dokładne, Berkov pisze bowiem o „optymalnym kompromisie pomiędzy szybkością a dokładnością obliczeń” ([40], str. 57). Ferre z kolei wykonuje w przestrzeni Fouriera operację podobną do filtrowania, ale jego propozycje są niestety niejasno opisane i trudne do zrozumienia [33]. Oddzielną grupę stanowią prace wykorzystujące metodę szybkich multipoli do przyspieszenia liczenia pola odnamagnesowania (ang. *fast multipole method*). Metoda ta polega na wprowadzeniu hierarchicznej organizacji, przy czym dla oddziaływania pomiędzy coraz dalszymi fragmentami próbki (komórkami), fragmenty te są grupowane w coraz większe zbiory [74]. W programach modelujących zgodnie z tą metodą i korzystających z okresowych warunków brzegowych można wykorzystać pomysł Apalkova by kolejne obrazy grupować w coraz większe zbiory [41].

Pomimo takiego spektrum propozycji, typowe implementacje PBC realizowane w dostępnych obecnie programach polegają na obcięciu zasięgu oddziaływania dipolowego, najprostszym rozwiązaniu, opisanym na początku tego ustępu. Najbardziej chyba obecnie popularny program OOMMF [28] jeszcze do niedawna nie wspierał żadnej formy PBC. Trochę mniej popularny, komercyjny program LLG Micromagnetics Simulator™ [75] umożliwia narzucenie PBC w jednym lub dwóch

wymiarach^{*}, przy czym szczegóły implementacji tego programu są z oczywistych względów utajone. Wiadomo jednak, że w *niektórych* wypadkach, dla 2D PBC generuje on błędy względne rzędu 10^{-4} [76]. W Europie jest popularny program „magpar” (typu *finite-element*) utworzony przez Wernera Scholza [77] – nie wspiera on jednak PBC. Trochę do niego podobny program „nmag” [29], utworzony w grupie Hansa Fangohra, wspiera PBC w jednym i dwóch wymiarach uwzględniając stałą, zadaną parametrem liczbę obrazów (domyślnie: 10). Wśród tych propozycji wyróżnia się kolejny komercyjny program „MicroMagus” [78]. Wspiera on PBC w jednym, dwóch, lub trzech wymiarach w oparciu o metodę Ewalda stosowaną w przestrzeni Fouriera [40, 73]. Nie jest on jednak zbyt popularny.

Na koniec warto wspomnieć problematyczną kwestię okresowych warunków brzegowych w trzech wymiarach. Berkov twierdzi na przykład, że dzięki jego metodzie jest to możliwe [40], autor niniejszej pracy skłonny jest twierdzić, że to w ogóle nie jest wykonalne – przyjmując w każdym razie definicję okresowych warunków brzegowych zgodną z intencją Borna. Z jednej strony za brakiem takiej możliwości przemawiają argumenty natury matematycznej przedstawione w rozdziale trzecim, z drugiej strony są argumenty o charakterze fizycznym dotyczące modelowania fragmentu makroskopowej, dużej struktury. W magnetyzmie bowiem, w przypadku okresowych warunków brzegowych w trzech wymiarach, nie jest po prostu spełnione założenie Borna, że rozwiązania „praktycznie nie zależą od kształtu próbki” [38]. W barwny sposób przedstawia to Aharoni, gdy przyznaje się on do błędu, który sam popełniał twierdząc kiedyś, że „spodziewamy się coraz mniejszej roli powierzchni dla coraz większych próbek” ([50], str. 210). Można dojść do takiego wniosku analizując

^{*} Zgodnie z ulotką, w LLG Micromagnetics Simulator™ można też stosować PBC w trzech wymiarach. Nie jest to jednak w tej chwili możliwe (Michael Scheinfein, informacja prywatna, 2006).

podłużną elipsoidę skierowaną swoją najdłuższą osią zgodnie z kierunkiem osi z . Niezależnie od rozmiaru tej elipsoidy, jeżeli jest ona jednorodnie namagnesowana, tj. $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{M} = \text{const}$, to pole odmagiesowania jest inne, gdy $\mathbf{M}$ jest równoległe do osi z , a inne niż, gdy jest prostopadłe do osi z . Różnica pomiędzy tymi przypadkami jest stała, nie dąży do zera wraz z rosnącym rozmiarem rozważanej próbki. Szerzej ten problem jest omówiony w pracy [79].

2.5 Regularne siatki podziału, twierdzenie o splocie

Wśród mikromagnetycznych programów modelujących popularne są programy typu FD (ang. *finite difference*), gdzie wszystkie komórki są jednakowe i siatka podziału jest regularna (ust. 2.2). Jak wiemy, tensor oddziaływania dipolowego pomiędzy komórkami A oraz B , $\mathbf{N}(\mathbf{r})$, jest funkcją ich względnego położenia, $\mathbf{r}(A,B)$. Dla siatek regularnych wektor $\mathbf{r}(A,B)$ zależy od indeksów komórek A i B tylko przez ich różnicę, co ma daleko idące konsekwencje. Możemy bowiem energię odmagiesowania zapisać jako (patrz (2.15) oraz (2.21)):

$$E_d = \frac{\mu_0}{2} V_{\text{el}} \sum_{i,j,k=1}^{n_x, n_y, n_z} \mathbf{M}(i, j, k) \sum_{i',j',k'=1}^{n_x, n_y, n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k'), \quad (2.22)$$

gdzie prostopadłościenna próbka^{*} jest podzielona siatką na zbiór dyskretnych komórek numerowanych wzdłuż osi x indeksem $i = 1..n_x$, wzdłuż osi y indeksem $j = 1..n_y$, oraz wzdłuż osi z indeksem $k = 1..n_z$. Jeżeli całkowitą liczbę komórek oznaczymy jako $n = n_x n_y n_z$, to liczba obliczeń potrzebnych do analizowania oddziaływań dipolowych przy stosowaniu wzoru (2.22) jest proporcjonalna do n^2 , czyli jest rzędu $O(n^2)$. Dlatego

^{*} Dla próbek nie posiadających kształtu prostopadłościennego definiujemy prostopadłościenny obszar V zawierający próbkę i ten obszar nazywamy „próbka”. Z takiego postępowania wynika, że pewne komórki próbki V mogą mieć zerowe namagnesowanie nasycenia M_s , co odpowiada próżni, brakowi materiału ferromagnetycznego. Jest to standardowe postępowanie stosowane w programach typu *finite difference*.

właśnie te oddziaływania zużywają najwięcej czasu w procesie modelowania, cała reszta bowiem oddziaływań, ze względu na ich lokalny lub krótkozasięgowy charakter, wymaga obliczeń których liczba jest rzędu $O(n)$.

Prawa część równania (2.22) zawiera jednak w sobie dyskretny spłot tensora i namagnesowania, $\mathbf{N} * \mathbf{M}$, gdzie operacja splotu jest oznaczona gwiazdką. Spłot taki można policzyć stosując twierdzenie o splotach przy pomocy szybkiego algorytmu FFT (ang. *Fast Fourier Transform*), który wymaga tylko $O(n \log(n))$ obliczeń. Oznacza to prawie n -krotne przyspieszenie działania programu! Dzięki temu twierdzeniu, sumowanie będące elementem splotu $\mathbf{N}$ i $\mathbf{M}$, a potrzebne do obliczenia pola odnamagnesowania:

$$\mathbf{H}_d(i, j, k) = - \sum_{i', j', k'=1}^{n_x, n_y, n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k') = -\mathbf{N} * \mathbf{M} \quad (2.23)$$

można zastąpić iloczynem $\tilde{\mathbf{N}}\tilde{\mathbf{M}}$, gdzie tylda nad obiektem oznacza jego transformatę Fouriera [40, 80]. Nie jest to żadne przybliżenie, oba działania dają dokładnie ten sam wynik, pod warunkiem jednak, że spełnione są odpowiednie założenia wymagane przez twierdzenie o splocie. Wymagania te zostaną przedstawione w następnym paragrafie. Dokładniej, cała procedura stosowana w mikromagnetycznych programach modelujących typu FD jest opisana poniżej. Zastosowałem tu konwencję, że $F(\bullet)$ oznacza transformatę Fouriera, $iF(\bullet)$ oznacza odwrotną transformatę Fouriera, a każdy krok ma podaną złożoność obliczeniową.

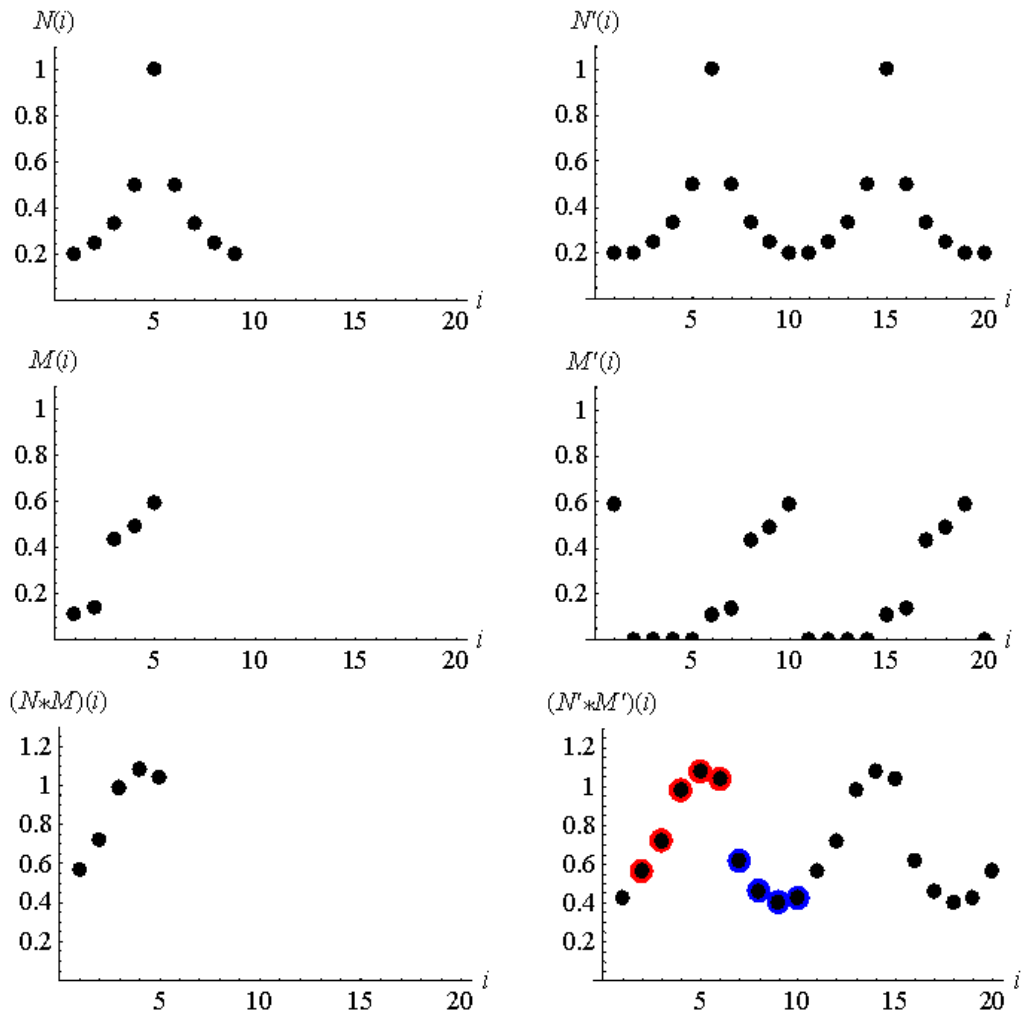
0.	$O(n \log(n))$	Obliczenie transformaty tensora, $\tilde{\mathbf{N}} = \mathbf{F}(\mathbf{N})$.
1.	$O(n \log(n))$	Obliczenie transformaty namagnesowania, $\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{F}(\mathbf{M})$.
2.	$O(n)$	Obliczenie pola odnamagnesowania w przestrzeni odwrotnej, czyli obliczenie iloczynu $\tilde{\mathbf{N}}\tilde{\mathbf{M}}$. Działanie to wykonujemy dla każdej komórki.
3.	$O(n \log(n))$	Obliczenie pola odnamagnesowania w przestrzeni rzeczywistej, $\mathbf{H}_d = i\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{N}}\tilde{\mathbf{M}})$.
4.	$O(n)$	Obliczenie energii, $E_d \propto -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_d$. Działanie to wykonujemy dla każdej komórki.

Widać zatem, że całkowity koszt obliczeń jest rzędu $O(n \log(n))$. Krok numer „0”, potencjalnie czasochłonny (procedura liczenia tensora jest skomplikowana, patrz ust. 3.2 i następne), jest wykonywany zwykle tylko jeden raz, na początku procesu modelowania. Wynika to z faktu, że tensor odnamagnesowania zależy od geometrii siatki dyskretyzacji, a nie zależy od aktualnego rozkładu namagnesowania. Pozostałe kroki, 1..4, są wykonywane po kolei w trakcie pracy programu i analizy oddziaływania dipolowego dla różnych rozkładów namagnesowania.

Aby przedstawić warunki jakie muszą być spełnione, by można było stosować twierdzenie o splocie, dla uproszczenia rozważę przypadek jednowymiarowy, gdzie namagnesowanie jak i uogólniony tensor odnamagnesowania są skalarnymi funkcjami jednego argumentu na dyskretnej dziedzinie^{*}: $M(i)$, $i = 1 \dots n$; $N(j)$, $j = 1 \dots 2n-1$. Dzięki takiemu uproszczeniu będę mógł posłużyć się pomocniczymi rysunkami. By stosować twierdzenie o splocie, funkcje M i N muszą być periodyczne i muszą mieć też ten sam

^{*} Tensor N ma większą dziedzinę niż M , co wynika z równania (2.23).

okres [80]. Warunki te są, oczywiście, nie spełnione (rozważamy na razie przypadek bez PBC), choćby z powodu ograniczonej dziedziny obu tych funkcji. W tej sytuacji, definiuje się periodyczną funkcję M' (periodyczną, zatem o nieskończonej dziedzinie), o okresie $2n-1$, której każdy okres składa się z n wartości funkcji M dopełnionych $n-1$ zerami. Analogicznie, definiujemy periodyczną funkcję N' , której każdy okres składa się z $2n-1$ wartości funkcji N . Proces powyższy to właśnie technika „uzupełniania zerami” (ang. *zero padding*) stosowana w analizie sygnałów [80, 81]. Dzięki uzupełnieniu funkcji namagnesowania odpowiednią liczbą zer, szukane punkty splotu $M * N$, są podzbiorem splotu funkcji periodycznych, $M' * N'$. Jest to przedstawione na Rys. 2-13.

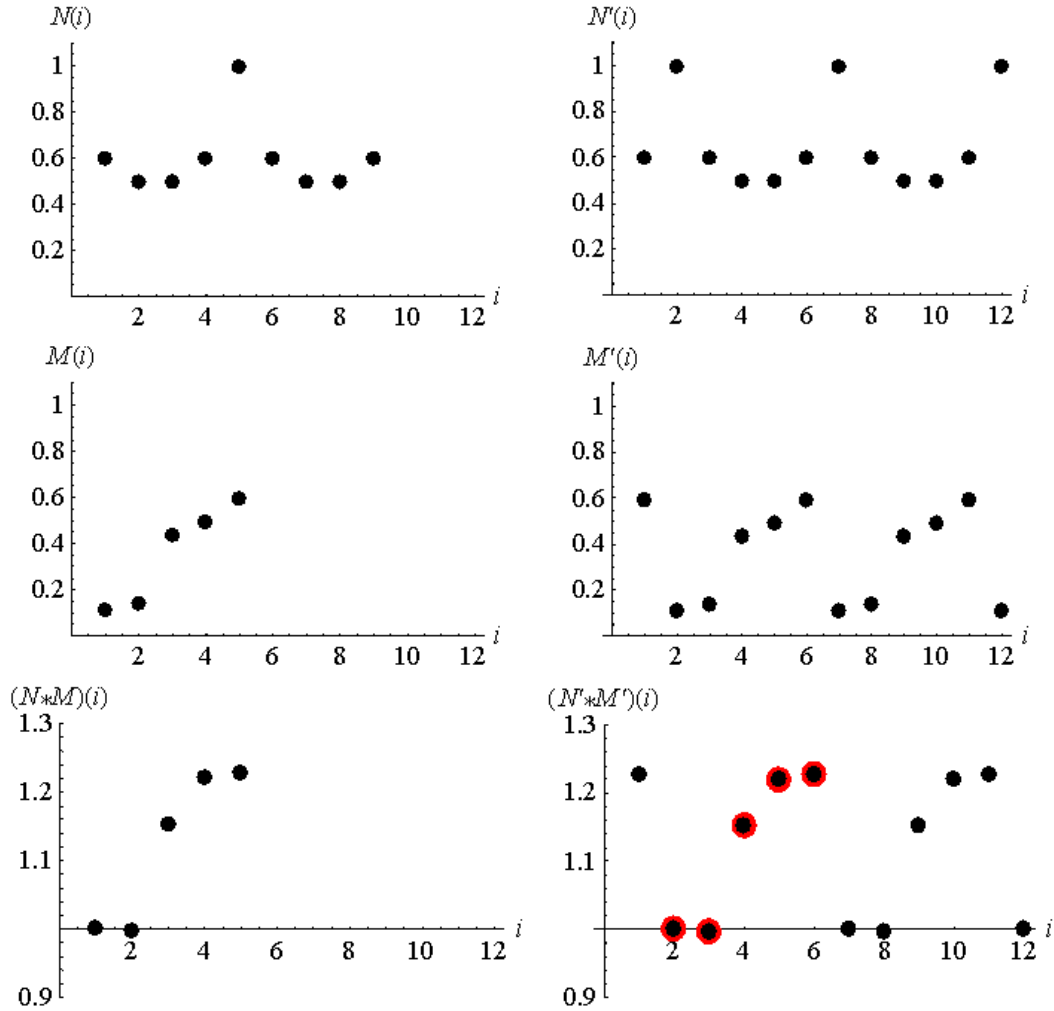


Rys. 2-13 Przykład, jak twierdzenie o splocie jest wykorzystywane w mikromagnetyzmie do analizy oddziaływań dipolowych. Dla uproszczenia rozważany jest przypadek jednowymiarowy. Lewa część: funkcje namagnesowania i tensor odmagnesowania, odpowiednio M i N . Ich dziedziny, to odpowiednio $1 \dots n$ i $1 \dots 2n-1$ (tutaj $n = 5$). Zatem, spłot $M * N$ (równanie (2.23)) zwraca n punktów (dolny wykres).

Prawa część: zdefiniowano periodyczne funkcje (tj. o nieskończonej dziedzinie) M' i N' , obie o okresie $2n-1$, przy czym jeden okres funkcji M' składa się z funkcji M uzupełnionej $n-1$ zerami. Dolny wykres: dzięki odpowiedniemu uzupełnieniu zerami, jeden okres spłotu $M' * N'$ (punkty czarne) zawiera n punktów dokładnie równych spłotowi $M * N$ (punkty czerwone). Pozostałe $n-1$ punktów spłotu $M' * N'$ odrzucamy (punkty niebieskie), są one obciążone efektem zaburzenia brzegowego (ang. *wraparound distortion*) obecnego przy procesie uzupełniania zerami [81]. Spłot periodycznych funkcji M' i N' można obliczyć w dokładny sposób stosując twierdzenie o splocie korzystając z szybkiego algorytmu FFT.

Jeżeli mamy do czynienia z periodycznymi warunkami brzegowymi sytuacja ulega drobnej, ale brzemiennej w skutkach zmianie: jeżeli dany wymiar jest zgodny z kierunkiem PBC, to tensor odmagnesowania spełnia zależność: $N(i) = N(i+n)$ (patrz

ust. 3.2, tam tensor ten jest określany jako N^{PBC}). W tej sytuacji, można zdefiniować periodyczne funkcje M' i N' analogicznie, jak przedstawiłem to powyżej, z tą różnicą, że tym razem mogą one mieć mniejszy okres: n , oraz, że tym razem uzupełnianie zerami funkcji M' nie jest potrzebne. Sytuację tę obrazuje Rys. 2-14.



Rys. 2-14 Stosowanie twierdzenia o splocie w przypadku periodycznych warunków brzegowych, rysunek analogiczny do Rys. 2-13. Tym razem, periodyczne funkcje M' i N' mają mniejszy okres: n (nadal $n = 5$). Brak jest też punktów za splotu $M' * N'$, które odrzucamy.

Rozważanie funkcji periodycznych o prawie dwa razy mniejszym okresie pozwala na znaczne przyspieszenie obliczeń. W opracowanym przeze mnie programie właściwość ta została wykorzystana w testowym module `Klm_SimpleDemag`, patrz ust. 6.2. Gdybyśmy jednak nie chcieli, lub nie mogli korzystać z możliwości wprowadzanie

periodyczności o okresie n , to nadal możemy korzystać z periodycznych funkcji M' i N' o okresie $2n-1$.

Na koniec pragnąłbym zwrócić uwagę, że twierdzenie o splocie jest w sposób dogłębny przedstawione w książce Brigham [80], czytelnik może też skorzystać z cyklu artykułów Donnelly i Rusta – patrz początek tej serii: [81]. Zastosowanie tego twierdzenia w modelowaniu mikromagnetycznym jest omówione w pracy Berkova [40].

* Taka sytuacja może mieć np. miejsce gdy dany algorytm FFT wymaga, by okres funkcji M' i N' był potęgą dwójki – jeżeli tak nie jest trzeba poszerzyć dziedzinę funkcji M i N poprzez uzupełnianie zerami, patrz dodatek 6.2.

3 Opracowana metoda uwzględniania PBC

W poniższym rozdziale zostanie przedstawiona metoda stosowania periodycznych warunków brzegowych (PBC) przy obliczaniu oddziaływań dipolowych w modelowaniu mikromagnetycznym w pełni uwzględniając ich długozasięgowy charakter. Jak wiemy z poprzedniego rozdziału, zastosowanie PBC właśnie do długozasięgowych oddziaływań jest wyzwaniem, z którym próbowało się zmierzyć już paru autorów. Zastosowanie PBC do innych oddziaływań, lokalnych lub krótkozasięgowych, jest proste. Analiza błędów numerycznych pojawiających się w zaproponowanej przeze mnie metodzie będzie bardzo ważną częścią tej pracy.

W celu uproszczenia wyjaśnień, przedstawiona metoda zostanie opisana na przykładzie warunków brzegowych periodycznych w jednym wymiarze (1D PBC). Jest ona jednak ogólna i można ją równie dobrze stosować dla przypadku 2D PBC. Jeżeli chcielibyśmy jednak narzucić periodyczność warunków brzegowych we wszystkich trzech wymiarach, napotkamy już problemy. Kwestia możliwości i skutków stosowania periodycznych warunków brzegowych w trzech wymiarach będzie szerzej omówiona w pracy [79]. Dla ustalenia uwagi przyjmuję kierunek periodyczności równoległy do osi z . Oddzielnego komentarza wymaga też kwestia regularnej siatki dyskretyzacji. Zarówno przedstawione w tej pracy wzory, jak i implementacja zaproponowanego przeze mnie algorytmu w postaci modułu programu OOMMF zostały wykonane dla regularnej siatki zbudowanej z sześciennych komórek. Używanie prostopadłościennych komórek nie będących sześcianami skomplikowałoby głównie ust. 3.3. Najważniejsze elementy zaprezentowanej metody: kontrola dokładności wyników i uwzględnienie nieskończonego zasięgu oddziaływań dipolowych, mogą być jednak wykorzystane też

w przypadkach prostopadłościennych komórek lub nawet nieregularnej siatki komórek.

Do kwestii tej wróć jeszcze w podsumowaniu, na koniec tego rozdziału.

3.1 Wprowadzenie

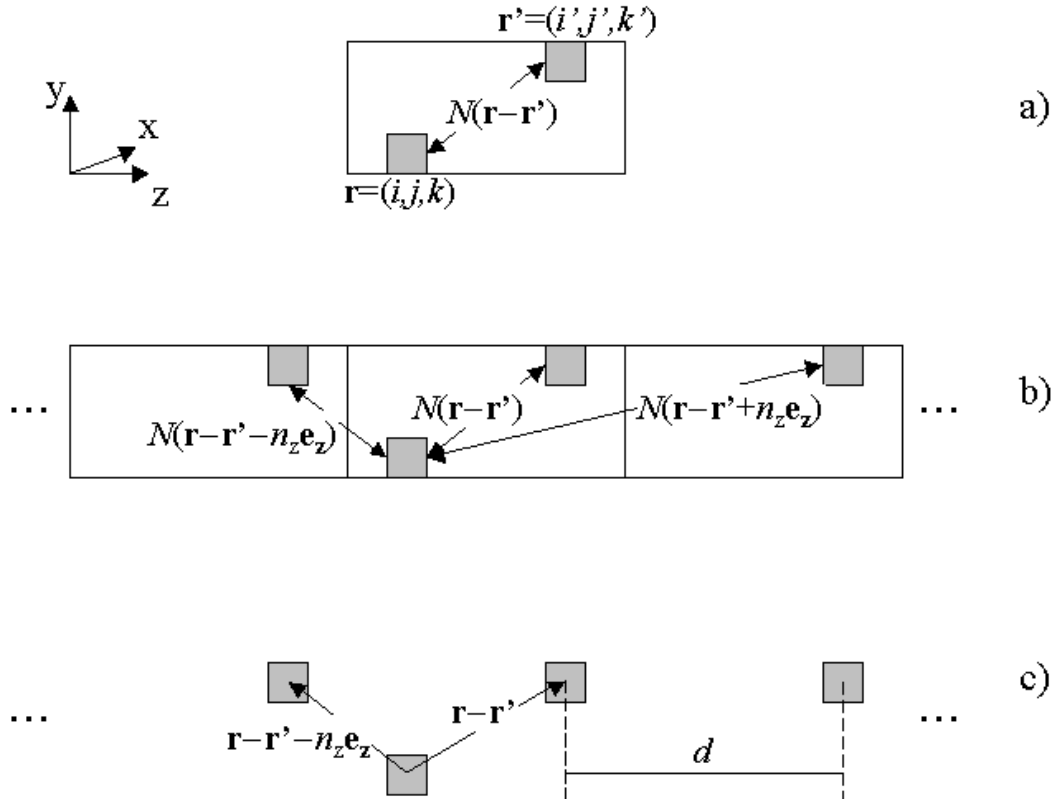
Niech prostopadłościenna próbka^{*} będzie podzielona regularną siatką na zbiór jednakowych prostopadłościennych komórek numerowanych wzdłuż osi x indeksem $i = 1..n_x$, wzdłuż osi y indeksem $j = 1..n_y$ oraz wzdłuż osi z indeksem $k = 1..n_z$. Krawędzie komórek są równoległe do osi układu współrzędnych. Całkowita liczba komórek próbki wynosi $n = n_x n_y n_z$. Dwie wybrane komórki próbki są schematycznie pokazane na Rys. 3-1 a). Układ współrzędnych jest dobrany tak, że wektor położenia komórki[†] o indeksach (i,j,k) jest równy:

$$\mathbf{r} = i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z, \quad (3.1)$$

gdzie wektory $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ są skierowane wzdłuż odpowiednich osi współrzędnych a ich długości odpowiadają długości odpowiednich krawędzi prostopadłościennej komórki. Wektor położenia komórki będę symbolicznie zapisywać podając trójkę liczb: $\mathbf{r} = (i,j,k)$. Na tym rysunku został też przedstawiony uogólniony tensor od magnesowania dla oddziałującej pary komórek. Z ust. 2.3 wiemy, że ten tensor jest funkcją wzajemnego położenia komórek, $N(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = N(i-i',j-j',k-k')$.

^{*} Patrz przypis na stronie 46.

[†] Wektor położenia komórki jest skierowany od środka układu współrzędnych do środka ciężkości komórki.



Rys. 3-1 Przy braku okresowych warunków brzegowych (a), komórki próbki są numerowane od (1,1,1) do (n_x, n_y, n_z) . Wprowadzenie PBC w jednym wymiarze (b, c) skutkuje powstaniem nieskończonej liczby „obrazów”. Zaznaczyłem tensor odmagnesowania dla wskazanych par komórek, wektory ich wzajemnego położenia, oraz okres periodyczności, $d = n_z |\mathbf{e}_z|$, patrz równanie (3.1). Rysunek schematyczny.

Przy narzuceniu okresowych warunków brzegowych mamy do czynienia z nieskończonym szeregiem obrazów rozważanej próbki, wszystkie komórki musimy zatem numerować wzdłuż osi z indeksem należącym do przedziału od $-\infty$ do $+\infty$, patrz Rys. 3-1 b) i c). Taki nieskończony zbiór liczb całkowitych możemy podzielić na rozłączne podzbiory odpowiadające poszczególnym obrazom: $\dots, (-n_z+1, -n_z+2, \dots, 0)$, $(1, 2, \dots, n_z)$, $(n_z+1, n_z+2, \dots, 2n_z)$, $\dots$, co zaraz wykorzystam we wzorze (3.4). O ile bez PBC pole odmagnesowania w zadanym punkcie (zadanej komórce) liczymy sumując n elementów (patrz wzór (2.23)):

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_d(i, j, k) &= - \sum_{i', j', k'=1}^{n_x, n_y, n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k') \\
&= - \sum_{i'=1}^{n_x} \sum_{j'=1}^{n_y} \sum_{k'=1}^{n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k'),
\end{aligned} \tag{3.2}$$

to w przypadku z PBC mamy nieskończona sumę:

$$\mathbf{H}_d^{\text{PBC}}(i, j, k) = - \sum_{i', j'=1}^{n_x, n_y} \sum_{k'=-\infty}^{+\infty} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k'), \tag{3.3}$$

gdzie tym razem $k \in \mathbb{Z}$, choć tak naprawdę ciekawy jest dla nas obszar „zerowego” obrazu, gdzie $k \in (1, n_z)$. Wykonam teraz kilka przekształceń wzoru (3.3) opisanych poniżej.

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_d^{\text{PBC}}(i, j, k) &= - \sum_{i', j'=1}^{n_x, n_y} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{m'=1}^{n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-(hn_z+m')) \mathbf{M}(i', j', hn_z+m') \\
&= - \sum_{i', j'=1}^{n_x, n_y} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{m'=1}^{n_z} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-(hn_z+m')) \mathbf{M}(i', j', m') \\
&= - \sum_{i', j'=1}^{n_x, n_y} \sum_{m'=1}^{n_z} \left(\sum_{h=-\infty}^{+\infty} \mathbf{N}(i-i', j-j', k-m'+hn_z) \right) \mathbf{M}(i', j', m')
\end{aligned} \tag{3.4}$$

W pierwszej linijce wprowadziłem oddzielne sumowanie po obrazach (indeks h) i komórkach wewnątrz obrazu (indeks m'). W drugiej linijce skorzystałem z periodyczności namagnesowania, wynikającej z przyjętych warunków brzegowych: $\mathbf{M}(i, j, k) = \mathbf{M}(i, j, k+n_z)$. W trzeciej linijce dokonałem podstawienia $h \rightarrow -h$ oraz przegrupowania tak, by sumowanie po indeksie h dotyczyło tylko tensora. Zamiana kolejności sumowania po h i m' może być uzasadniona w następujący sposób. Niech d oznacza okres periodyczności warunków brzegowych (Rys. 3-1). Teraz, $\mathbf{N}(i, j, k+hn_z)$ może zostać zmajoryzowane oddziaływaniem dipoli punktowych, czyli zależnością rzędu $O(|h|d^{-3})$. Stąd, sumy występujące we wzorze (3.4) są absolutnie zbieżne i może być zastosowanie twierdzenie Fubinięgo. Równanie (3.4) można przepisać w następującej formie

$$\mathbf{H}_d^{\text{PBC}}(i, j, k) = - \sum_{i', j', k'=1}^{n_x, n_y, n_z} \mathbf{N}^{\text{PBC}}(i-i', j-j', k-k') \mathbf{M}(i', j', k'), \quad (3.5)$$

gdzie zdefiniowałem nową wielkość:

$$\mathbf{N}^{\text{PBC}}(i, j, k) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \mathbf{N}(i, j, k + hn_z). \quad (3.6)$$

Wzór (3.5) ma taką samą formę, jak jego odpowiednik (3.2) przy braku stosowania periodycznych warunków brzegowych, trzeba tylko funkcję tensorową $\mathbf{N}$ zastąpić funkcją $\mathbf{N}^{\text{PBC}}$, zdefiniowaną w równaniu (3.6). Oznacza to, że:

Zaproponowana metoda uwzględniania periodycznych warunków brzegowych sprowadza się do modyfikacji sposobu obliczania tensora od magnesowania. Zamiast funkcji $\mathbf{N}(i, j, k)$ wystarczy stosować funkcję $\mathbf{N}^{\text{PBC}}(i, j, k)$ zdefiniowaną we wzorze (3.6).

Podejście takie ma dwie zalety:

- W wyniku implementacji PBC proces modelowania mikromagnetycznego jest zmieniony w niewielki sposób. Jak zaraz pokażę, tensor $\mathbf{N}^{\text{PBC}}$ ma te same cechy (np. symetrie), co tensor $\mathbf{N}$. Zatem wprowadzenie periodycznych warunków brzegowych oznacza zmianę sposobu liczenia tensora od magnesowania, ale nie modyfikuje reszty procesu modelującego.
- Fragment procesu modelującego, odpowiedzialny za liczenie tensora $\mathbf{N}$, jest zwykle wykonywany raz, na początku tego procesu. Jeżeli zamiast tego skorzystamy z procedury liczącej $\mathbf{N}^{\text{PBC}}$, potencjalnie czasochłonnej ze względu na sumowanie obecne we wzorze (3.6), to wydłużamy tylko fazę inicjacji modelowania.

Trzeba jednak równolegle podkreślić zasadniczy problem wynikający z nieskończonego zakresu sumowania we wzorze (3.6), które musi być wykonane przez komputer w skończonym czasie.

3.2 Własności tensora N^{PBC}

Ważną cechą tensora zdefiniowanego zgodnie ze wzorem (3.6) jest fakt posiadania przez niego tych samych własności, co tensor dla przypadku braku PBC, N . Własności te zostaną po kolei opisane poniżej:

- A) Istotną cechą tensora N jest fakt, że zależy on tylko od względnego położenia oddziałujących komórek, $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$, patrz Rys. 3-1 a. Jest to bardzo ważne, gdyż dzięki temu możliwe jest stosowanie algorytmu FFT znacznie przyspieszającego obliczenia oddziaływań dipolowych (ust. 2.5). Tę samą cechę posiada też tensor N^{PBC} .
- B) Przydatną cechą, przyspieszającą obliczenia, jest parzystość (lub nieparzystość) elementów tensora $N_{\alpha\beta}$ względem składowych wektora względnego położenia komórek (ust. 2.3, Rys. 2-7). Jak pokażę w ust. 3.2.1, tę samą własność posiadają elementy $N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}$.
- C) Oprócz wymienionych cech charakterystycznych dla tensora N , gdy narzucamy okresowe warunki brzegowe, tensor N^{PBC} jest okresowy w trzecim argumencie, co wynika ze wzoru (3.6): $N^{\text{PBC}}(i, j, k) = N^{\text{PBC}}(i, j, k + n_z)$. Można zatem stosować twierdzenie o splocie bezpośrednio, bez konieczności „uzupełniania zerami” – bo teraz zarówno funkcja „sygnału” jak i „odpowiedzi” jest okresowa z tym samym okresem, patrz ust. 2.5. Można w ten sposób znacznie przyspieszyć obliczenia i zmniejszyć zapotrzebowanie na pamięć komputera.

3.2.1 Parzystość elementów tensora N^{PBC}

Przedstawię tutaj dowód parzystości/nieparzystości elementów tensora $N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}$.

Przypominam, że tensor N dla braku okresowych warunków brzegowych cechuje się następującą symetrią. Jego elementy diagonalne są parzystą funkcją składowych wektora wzajemnego położenia rozważanych dwóch komórek $\mathbf{r}=(i,j,k)$: $N_{\alpha\alpha}(i,j,k) = N_{\alpha\alpha}(-i,j,k) = N_{\alpha\alpha}(i,-j,k) = N_{\alpha\alpha}(i,j,-k)$, natomiast jego elementy poza-diagonalne, $N_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$), są nieparzystą funkcją współrzędnych α i β wektora $\mathbf{r}$, natomiast parzystą

funkcją trzeciej współrzędnej. Czyli, na przykładzie elementu N_{xy} : $N_{xy}(i,j,k) = -N_{xy}(-i,j,k) = -N_{xy}(i,-j,k) = N_{xy}(i,j,-k)$ (ust. 2.3). Rozważmy zatem dany element tensora dla przypadku bez PBC, $N_{\alpha\beta}$, (diagonalny lub nie), który jest parzystą ($\gamma = +1$) lub nieparzystą ($\gamma = -1$) funkcją trzeciej współrzędnej, która jest kierunkiem periodyczności. Oznaczając σ_z jako operację zmiany znaku składowej k mamy zatem:

$$\sigma_z(N_{\alpha\beta}(i,j,k)) = N_{\alpha\beta}(i,j,-k) = \gamma N_{\alpha\beta}(i,j,k). \quad (3.7)$$

Zastosowanie operacji σ_z do elementu tensora $N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}$ jest opisane równaniami poniżej:

$$\begin{aligned} \sigma_z(N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}(i,j,k)) &= N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}(i,j,-k) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} N_{\alpha\beta}(i,j,-k + hn_z) = \\ &= \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \gamma N_{\alpha\beta}(i,j,k - hn_z) = \gamma \sum_{h'=-\infty}^{+\infty} N_{\alpha\beta}(i,j,k + h'n_z) = \gamma N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}(i,j,k). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Badania parzystości względem współrzędnych i oraz j jest trywialne. Także w tych przypadkach $N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}$ ma taką parzystość, jak $N_{\alpha\beta}$. Widać zatem, że elementy tensora $N_{\alpha\beta}^{\text{PBC}}$ mają te same cechy parzystości/nieparzystości, jak w przypadku bez PBC.

3.3 Dokładność numeryczna wzorów Newella

Ze względu na potencjalnie dużą liczbę składników sumy we wzorze (3.6), należy uważnie kontrolować ewentualnie powstające błędy. Wynika to z tego, że np. jeżeli składniki sumy są obciążone błędem względnym 15%, to błąd sumy jest co najmniej 15%, a może się zdarzyć, że będzie on wielokrotnie większy jeżeli elementy sumy mają przeciwne znaki, czyli się znoszą, a błędy się kumulują.

Jak zaznaczyłem w ust. 2.3, z szeregu prac dotyczących uogólnionego tensora od magnesowania dla oddziaływujących prostopadłościennych komórek, w niniejszej rozprawie będę się opierał na wzorach Newella [63]. W celu oszacowania ich numerycznej dokładności zastosowałem następującą metodę.

- Rozwazałem sześciennie komórki, jako najbardziej popularne w badaniach mikromagnetycznych.
- Wybrałem ograniczony obszar przestrzeni (opisany poniżej) dla którego obliczyłem tensor metodą „dokładną”, tj. korzystając ze wzorów zamieszczonych w pracy [63]. W tych obliczeniach korzystałem z najdokładniejszych, dostępnych w komputerach PC, liczb zmiennopozycyjnych – tj. liczbach podwójnej precyzji, które mają 15-16 cyfr znaczących^{*}. Tensor tak obliczony nazwałem N^{cube} .
- Dla porównania obliczałem też tensor zaniedbując prostopadłościenny kształt oddziałujących komórek i traktując je jako kulki, o takiej samej objętości, V_{el} , i o tym samym namagnesowaniu. Ponieważ pole na zewnątrz namagnesowanej kulki jest takie samo jak pole pochodzące od dipola umieszczonego w jej środku [63], ta metoda jest równoważna przybliżeniu dipola punktowego. Wzory na tensor liczony tą metodą można znaleźć w pracy [63]. Tak, jak i w poprzednim wypadku, obliczenia te wykonywałem na liczbach zmiennopozycyjnych podwójnej precyzji. Tak obliczony tensor nazwałem N^{sphr} .

^{*} Zgodnie ze standardem IEEE-754, liczby podwójnej precyzji zapisywane są na 64 bitach, przy czym na mantysę przypadają 52 bity. Zatem, obliczenia zgodne z tym standardem mają $52 \log_{10}(2) \approx 15.6536$ cyfr znaczących.

- Aby mieć wgląd w dokładną wartość tensora, wzory Newella przepisałem do programu *Mathematica*, który zwracał mi wyniki z szesnastoma dokładnymi cyframi.

Program *Mathematica* dysponuje mechanizmem pozwalającym wykonywać operacje dbając o zadaną z góry liczbę dokładnych cyfr w wyniku. W tym celu, operacje te są wykonywane przez wewnętrzny silnik na liczbach o zwiększonej ilości cyfr znaczących. Dla takich wewnętrznych operacji, maksymalna ilość cyfr znaczących jest określona przez parametr `$MaxExtraPrecision`, domyślnie równy 50. W moim wypadku, przy liczeniu elementu diagonalnego N_{xx} program *Mathematica* zwracał czasami komunikat o niedokładności wyników końcowych z powodu zbyt małego parametru `$MaxExtraPrecision`. Komunikaty te zdarzały się mniej więcej raz na tysiąc obliczeń. Nie wpływa to istotnie na wartość dopasowanych współczynników, podanych we wzorach (3.10).

Chociaż wzory przedstawione w rekurencyjnej formie w pracy [63], wyglądają w miarę prosto, to jednak po ich rozwikłaniu otrzymujemy długi i skomplikowany wzór na sumę – wzór, którego obliczanie może być obciążone dużym, numerycznym błędem [82]. Dla przykładu proszę spojrzeć na Rys. 3-2, gdzie przedstawiłem wzór na element N_{xx} .

Tensor obliczony przez program *Mathematica* nazwałem N^{prec} .

- Ponieważ tensor N oddziaływania pomiędzy dwiema komórkami cechuje parzystość omówiona w ust. 2.3, a przedstawiona na Rys. 2-7, to wystarczyło rozważyć sytuację, kiedy jedna komórka jest w środku układu współrzędnych, a druga jest przesunięta względem niej o wektor $\mathbf{r}$, który ma współrzędne kartezjańskie (x, y, z) , gdzie $x \in 0..200$, $y \in 0..200$, $z \in 0..200$. Wybór rozmiaru tego oktantu został podyktowany względami praktycznymi: dla analizy błędów oczywiście najlepiej byłoby przyjąć jak największy rozmiar, czyli analizować jak najwięcej danych. Z drugiej strony analizowanie zbyt dużej ilości punktów jest niemożliwe. Końcowy rezultat analizy, Rys. 3-5 (gdzie oś pozioma obejmuje zakres $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq 200$), wskazuje na wybór wystarczającego obszaru, pozwalającego już na dokonanie analizy błędów. Należy pamiętać, że na tym rysunku przedstawione są *miliony* punktów. Fakt istnienia symetrii elementów $N_{\alpha\beta}$ wystarczał, by nie rozważać innych oktantów. Dalej, ponieważ rozważana komórka miała symetryczny, sześcienny kształt (zatem, np. $N_{xx}(i,j,k) = N_{yy}(j,i,k)$), to wystarczyło dla tego obszaru rozważać tylko elementy tensora N_{xx} i N_{xy} .
- Uwaga**

Tensor N nie zmienia się, gdy wszystkie wymiary i odległości są przeskalowane o ten sam czynnik (ust. 2.3), dlatego mogłem przyjąć jednostkowy rozmiar rozważanej komórki i wtedy opisane powyżej współrzędne x, y, z są bezwymiarowe i są liczbami całkowitymi. Zatem, na przykład, $N(1,0,0)$ opisuje oddziaływanie pomiędzy dwoma sześcianami o wspólnej ścianie yz .

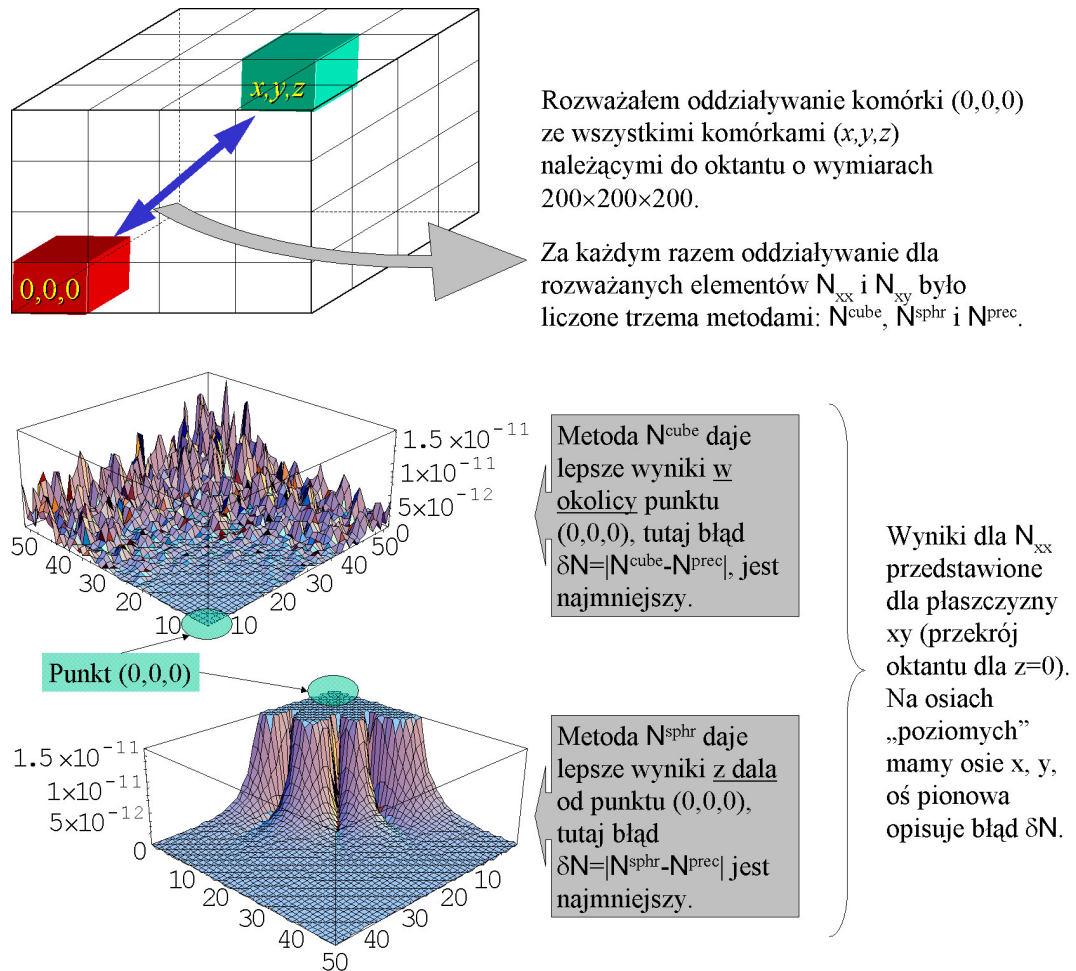
$$\begin{aligned}
& \frac{4}{3} (2x^2 - y^2 - z^2) \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - \frac{2}{3} (2(-dx + x)^2 - y^2 - z^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + y^2 + z^2} - \frac{2}{3} (2(dx + x)^2 - y^2 - z^2) \sqrt{(dx + x)^2 + y^2 + z^2} - \\
& \frac{2}{3} (2x^2 - (-dy + y)^2 - z^2) \sqrt{x^2 + (-dy + y)^2 + z^2} + \frac{1}{3} (2(-dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - z^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + z^2} + \\
& \frac{1}{3} (2(dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - z^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + z^2} - \frac{2}{3} (2x^2 - (dy + y)^2 - z^2) \sqrt{x^2 + (dy + y)^2 + z^2} + \\
& \frac{1}{3} (2(-dx + x)^2 - (dy + y)^2 - z^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2 + z^2} + \frac{1}{3} (2(dx + x)^2 - (dy + y)^2 - z^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2 + z^2} - \\
& \frac{2}{3} (2x^2 - y^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{x^2 + y^2 + (-dz + z)^2} + \frac{1}{3} (2(-dx + x)^2 - y^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + y^2 + (-dz + z)^2} + \\
& \frac{1}{3} (2(dx + x)^2 - y^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + y^2 + (-dz + z)^2} + \frac{1}{3} (2x^2 - (-dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{x^2 + (-dy + y)^2 + (-dz + z)^2} - \\
& \frac{1}{6} (2(-dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + (-dz + z)^2} - \\
& \frac{1}{6} (2(dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + (-dz + z)^2} + \frac{1}{3} (2x^2 - (dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{x^2 + (dy + y)^2 + (-dz + z)^2} - \\
& \frac{1}{6} (2(-dx + x)^2 - (dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2 + (-dz + z)^2} - \frac{1}{6} (2(dx + x)^2 - (dy + y)^2 - (-dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2 + (-dz + z)^2} - \\
& \frac{2}{3} (2x^2 - y^2 - (dz + z)^2) \sqrt{x^2 + y^2 + (dz + z)^2} + \frac{1}{3} (2(-dx + x)^2 - y^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + y^2 + (dz + z)^2} + \\
& \frac{1}{3} (2(dx + x)^2 - y^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + y^2 + (dz + z)^2} + \frac{1}{3} (2x^2 - (-dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{x^2 + (-dy + y)^2 + (dz + z)^2} - \\
& \frac{1}{6} (2(-dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + (dz + z)^2} - \frac{1}{6} (2(dx + x)^2 - (-dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2 + (dz + z)^2} + \\
& \frac{1}{3} (2x^2 - (dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{x^2 + (dy + y)^2 + (dz + z)^2} - \frac{1}{6} (2(-dx + x)^2 - (dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2 + (dz + z)^2} - \\
& \frac{1}{6} (2(dx + x)^2 - (dy + y)^2 - (dz + z)^2) \sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2 + (dz + z)^2} + 4(-x^2 + y^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right] - \\
& 2(-(-dx + x)^2 + y^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + y^2}}\right] - 2(-(-dx + x)^2 + y^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(dx + x)^2 + y^2}}\right] - 2(-x^2 + (-dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{x^2 + (-dy + y)^2}}\right] + \\
& (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] + (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] - \\
& 2(-x^2 + (dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{x^2 + (dy + y)^2}}\right] + (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] + \\
& (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) z \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] - 2(-x^2 + y^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right] + \\
& (-(-dx + x)^2 + y^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + y^2}}\right] + (-(-dx + x)^2 + y^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + y^2}}\right] + \\
& (-x^2 + (-dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{x^2 + (-dy + y)^2}}\right] - \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] + (-x^2 + (dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{x^2 + (dy + y)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] - \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) (-dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] - \\
& 2(-x^2 + y^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right] + (-(-dx + x)^2 + y^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + y^2}}\right] + (-(-dx + x)^2 + y^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + y^2}}\right] + \\
& (-x^2 + (-dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{x^2 + (-dy + y)^2}}\right] - \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (-dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (-dy + y)^2}}\right] + (-x^2 + (dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{x^2 + (dy + y)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(-dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] - \frac{1}{2} (-(-dx + x)^2 + (dy + y)^2) (dz + z) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dz + z}{\sqrt{(dx + x)^2 + (dy + y)^2}}\right] + \\
& 4y(-x^2 + z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right] \}
\end{aligned}$$

Rys. 3-2 Wzór na element N_{xx} (pomnożony przez czynnik $4\pi dx dy dz$) uogólnionego tensora demagnetyzacji po rozwikłaniu rekurencyjnej postaci przedstawionej w pracy Newella [63]. Dwa oddziałujące prostopadłościennie są odległe o wektor przesunięcia o składowych (x, y, z) . Prostopadłościennym mają rozmiar boków dx, dy, dz . Wzór ten przedstawia sumę kilkudziesięciu czynników, trzy początkowe z nich zaznaczyłem na żółto. Dokładniejsza analiza wskazuje na to, że wśród tych czynników można znaleźć pary, o zbliżonej wartości i przeciwnych znakach [82]. W rezultacie sumowania takich czynników następuje eskalacja błędów numerycznych. Przedstawiony wzór jest zgodny ze składnią programu *Mathematica*. Na tym rysunku jest pierwsza część wzoru, jego kontynuacja jest na następnej stronie.

$$\begin{aligned}
& -2(-dy+y)(-x^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{x^2+z^2}}\right] - 2(dy+y)(-x^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{x^2+z^2}}\right] - 2y(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(-dx+x)^2+z^2}}\right] + \\
& (-dy+y)(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+z^2}}\right] + (dy+y)(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+z^2}}\right] - \\
& 2y(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(dx+x)^2+z^2}}\right] + (-dy+y)(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+z^2}}\right] + \\
& (dy+y)(-(-dx+x)^2+z^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+z^2}}\right] - 2y(-x^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{x^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& (-dy+y)(-x^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{x^2+(-dz+z)^2}}\right] + (dy+y)(-x^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{x^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& y(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] - \frac{1}{2}(-dy+y)(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2}(dy+y)(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] + y(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2}(-dy+y)(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] - \frac{1}{2}(dy+y)(-(-dx+x)^2+(-dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+(-dz+z)^2}}\right] - \\
& 2y(-x^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{x^2+(dz+z)^2}}\right] + (-dy+y)(-x^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{x^2+(dz+z)^2}}\right] + \\
& (dy+y)(-x^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{x^2+(dz+z)^2}}\right] + y(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2}(-dy+y)(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] - \frac{1}{2}(dy+y)(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(-dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] + \\
& y(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{y}{\sqrt{(dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] - \frac{1}{2}(-dy+y)(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{-dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] - \\
& \frac{1}{2}(dy+y)(-(-dx+x)^2+(dz+z)^2) \operatorname{ArcSinh}\left[\frac{dy+y}{\sqrt{(dx+x)^2+(dz+z)^2}}\right] - 8xyz \operatorname{ArcTan}\left[\frac{yz}{x\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right] + \\
& 4(-dx+x)yz \operatorname{ArcTan}\left[\frac{yz}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+y^2+z^2}}\right] + 4(dx+x)yz \operatorname{ArcTan}\left[\frac{yz}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+y^2+z^2}}\right] + \\
& 4x(-dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)z}{x\sqrt{x^2+(-dy+y)^2+z^2}}\right] - 2(-dx+x)(-dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)z}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(-dy+y)^2+z^2}}\right] - \\
& 2(dx+x)(-dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)z}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(-dy+y)^2+z^2}}\right] + 4x(dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)z}{x\sqrt{x^2+(dy+y)^2+z^2}}\right] - \\
& 2(-dx+x)(dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)z}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(dy+y)^2+z^2}}\right] - 2(dx+x)(dy+y)z \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)z}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(dy+y)^2+z^2}}\right] + \\
& 4xy(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(-dz+z)}{x\sqrt{x^2+y^2+(-dz+z)^2}}\right] - 2(-dx+x)y(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(-dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+y^2+(-dz+z)^2}}\right] - \\
& 2(dx+x)y(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(-dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+y^2+(-dz+z)^2}}\right] - 2x(-dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(-dz+z)}{x\sqrt{x^2+(-dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& (-dx+x)(-dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(-dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(-dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& (dx+x)(-dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(-dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(-dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] - 2x(dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(-dz+z)}{x\sqrt{x^2+(dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& (-dx+x)(dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(-dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] + \\
& (dx+x)(dy+y)(-dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(-dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(dy+y)^2+(-dz+z)^2}}\right] + 4xy(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(dz+z)}{x\sqrt{x^2+y^2+(dz+z)^2}}\right] - \\
& 2(-dx+x)y(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+y^2+(dz+z)^2}}\right] - 2(dx+x)y(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{y(dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+y^2+(dz+z)^2}}\right] - \\
& 2x(-dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(dz+z)}{x\sqrt{x^2+(-dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] + (-dx+x)(-dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(-dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] + \\
& (dx+x)(-dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(-dy+y)(dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(-dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] - 2x(dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(dz+z)}{x\sqrt{x^2+(dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] + \\
& (-dx+x)(dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(dz+z)}{(-dx+x)\sqrt{(-dx+x)^2+(dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] + \\
& (dx+x)(dy+y)(dz+z) \operatorname{ArcTan}\left[\frac{(dy+y)(dz+z)}{(dx+x)\sqrt{(dx+x)^2+(dy+y)^2+(dz+z)^2}}\right] \}
\end{aligned}$$

Rys. 3-3 Ciąg dalszy wzoru przedstawionego na Rys. 3-2.

Chciałbym podkreślić, że wartości N^{cube} i N^{sphr} są liczone tak, jak w mikromagnetycznych programach modelujących, natomiast liczenie N^{prec} wymaga uruchomienia zaawansowanego programu *Mathematica*. Nie jest zatem możliwe, by w programach modelujących korzystać z wartości N^{prec} . Całość stosowanej przeze mnie metody jest schematycznie przedstawiona na Rys. 3-4.

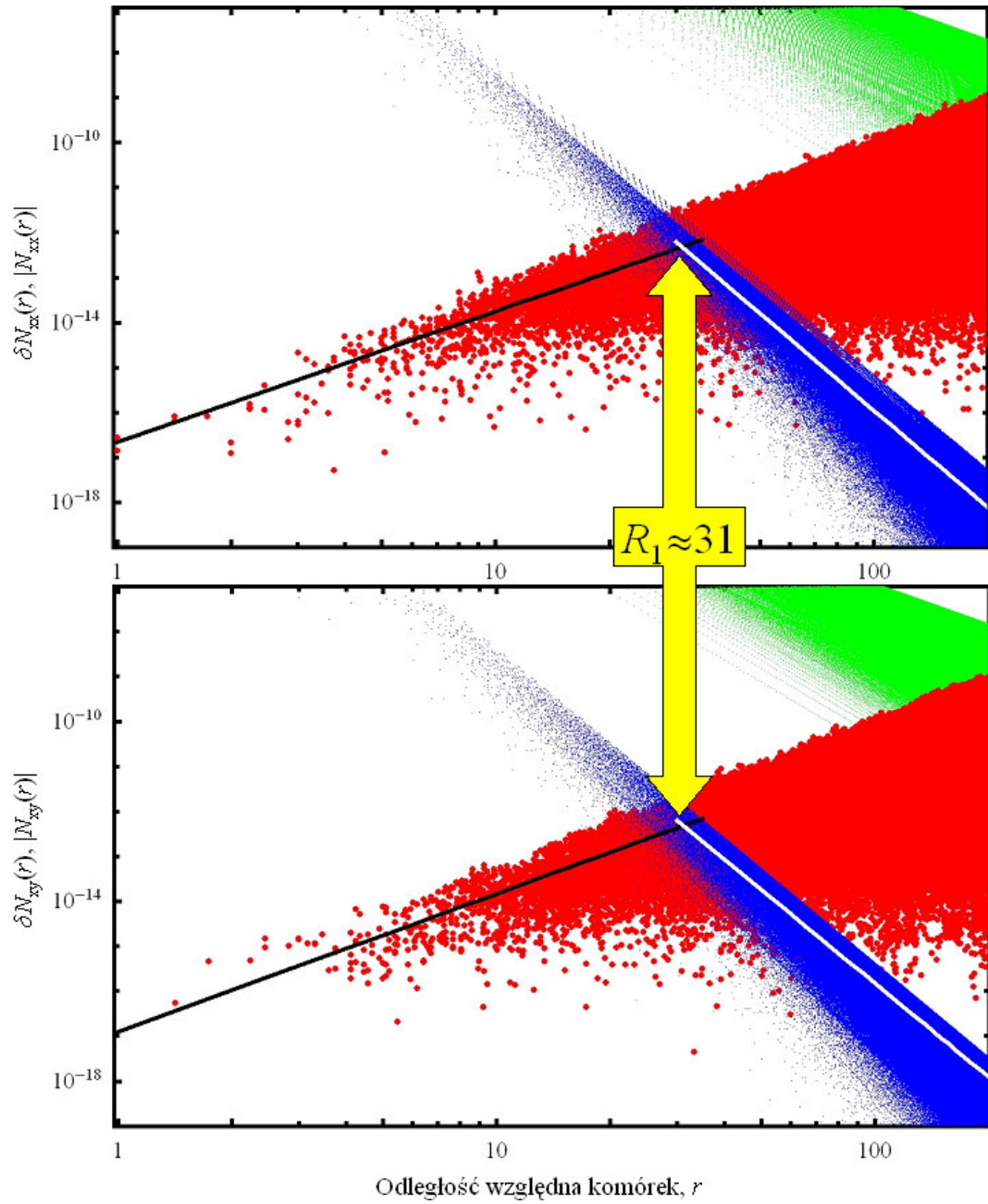


Rys. 3-4 Schemat badania błędów wzorów Newella, N^{cube} , i błędów metody dipolowej, N^{sphr} , poprzez ich porównanie z wynikami dokładnymi, N^{prec} . W dolnej części rysunku przedstawiam wykresy wykonane dla małego oktantu $50 \times 50 \times 50$.

Błędy wartości N^{cube} i N^{sphr} otrzymałem przez porównanie ich z wartościami dokładnymi:

$$\begin{aligned}\delta N^{\text{sphr}} &= \left| N^{\text{sphr}} - N^{\text{prec}} \right| \\ \delta N^{\text{cube}} &= \left| N^{\text{cube}} - N^{\text{prec}} \right|\end{aligned}\tag{3.9}$$

Błędy te analizowałem oddzielnie dla elementów N_{xx} i N_{xy} otrzymując odpowiednie wartości δN z indeksem dolnym „xx” lub „xy”. Ponieważ można się spodziewać zależności tych błędów od odległości względnej komórek, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, wykreśliłem wartości $\delta N^{\text{cube}}(r)$ i $\delta N^{\text{sphr}}(r)$ jako odpowiednio czerwone i niebieskie punkty na Rys. 3-5. Dodatkowo, na rysunku tym umieściłem wartości bezwzględne samego tensora (zielone punkty).



Rys. 3-5 Błędy $\delta N^{\text{cube}}(r)$ i $\delta N^{\text{sphr}}(r)$ (odpowiednio: czerwone i niebieskie punkty) ukazane w funkcji względnej odległości pomiędzy komórkami, r (wielkość bezwymiarowa). Górna część rysunku jest rezultatem analizy elementów N_{xx} , dolna: N_{xy} . Dodatkowo umieściłem na rysunkach wartości bezwzględne rozważanego elementu, $|N_{xx}|$ i $|N_{xy}|$ (punkty zielone). Wielkość R_1 określa granicę powyżej której lepiej stosować metodę N^{sphr} .

Z rysunku tego wynika, że rzeczywiście dla małego r wartości N^{cube} są obarczone najmniejszym błędem, natomiast począwszy mniej więcej od $r = 30$ lepiej jest stosować metodę N^{sphr} . W tym kontekście nazwanie tej metody „przybliżeniem” dipolowym jest

przynajmniej częściowo nieusprawiedliwione, dlatego będę unikał tego określenia. Z rysunku dalej wynika, że w okolicach $r = 200$, błędy δN^{cube} zaczynają być porównywalne z samymi wartościami liczonego tensora.

Otrzymane wyniki opracowałem zakładając, że punkty z Rys. 3-5 mają rozrzut normalny^{*} i dopasowałem do nich funkcję $\delta N(r) = Br^p$ szukając parametrów B i p . Pozwoliło mi to też na wyznaczenie wartości R_1 określającą granicę stosowania metod N^{cube} i N^{sphr} . Poniżej przedstawiam wyniki tego dopasowania dla diagonalnych i pozadiagonalnych elementów tensora N :

$$\begin{aligned} \delta N(r) &= Br^p, \\ B_{xx}^{\text{cube}} &\approx 2.2 \times 10^{-17}, p_{xx}^{\text{cube}} \approx 2.9, & B_{xx}^{\text{sphr}} &\approx 0.023, p_{xx}^{\text{sphr}} \approx -7.2, \\ B_{xy}^{\text{cube}} &\approx 1.2 \times 10^{-17}, p_{xy}^{\text{cube}} \approx 3.1, & B_{xy}^{\text{sphr}} &\approx 0.011, p_{xy}^{\text{sphr}} \approx -6.9, \\ R_1(N_{xx}) &\approx R_1(N_{xy}) \approx 31. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Na zakończenie warto zaznaczyć, że równolegle ze mną podobne badania prowadzi Donahue [82]. Jego podejście jest ukierunkowane na analizę wzorów Newella i poszukiwaniu ich odpowiedników/zamienników dla dużych wartości r . W rezultacie jego wnioski są czasami bardziej ogólne (np. dotyczą też komórek innych niż sześciiany) lub bardziej dokładne (np. wykładnik p^{sphr} równa się dokładnie -7), ale nie zawsze tak samo konkretne jak moje – nie jest np. podana konkretna wartość R_1 .

3.4 Uwzględnienie nieskończonego zasięgu oddziaływania dipolowego

Z rozdziału drugiego wiemy, że wielu autorów ucina sumę występującą we wzorze (3.6) ograniczając ją do pewnego zakresu indeksów $h = -g..g$. Podejście to, poniekąd zapoczątkowane przez Zhu [69], a stosowane i obecnie, nie jest wcale

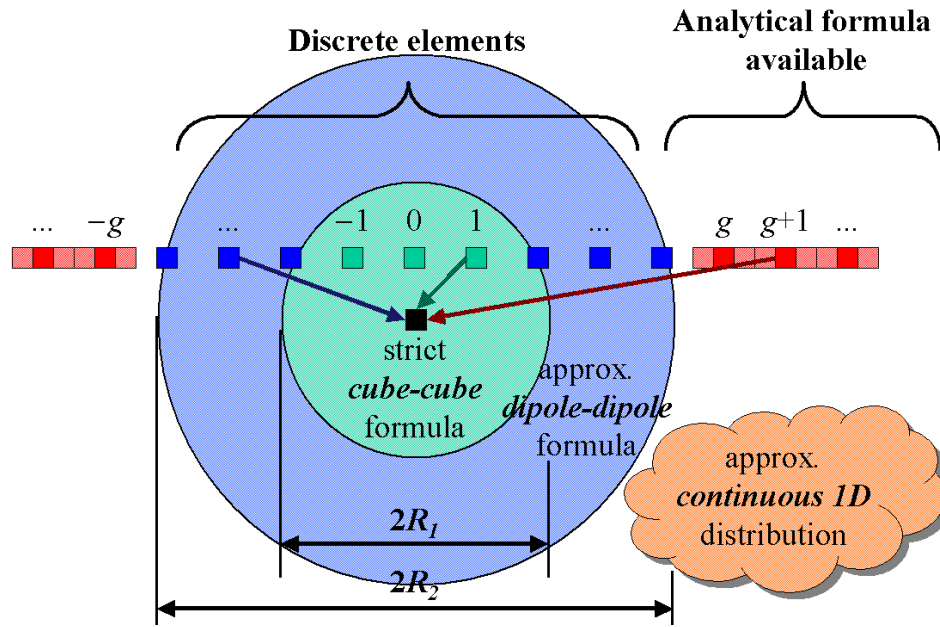
^{*} Jest to przybliżenie. Z Rys. 3-4 widać, że wartości N^{sphr} cechuje pewna regularność.

potrzebne. Wystarczy bowiem przyjąć przybliżenie, według którego oddziaływanie pomiędzy odległymi prostopadłościennymi komórkami może być opisane wzorem dla ciągłego rozkładu momentu dipolowego z jednej strony, a jednorodnie namagnesowaną kulką z drugiej strony. Dzięki temu przybliżeniu sumę $\sum N^{\text{sphr}}$ będzie można zastąpić całką z odpowiedniej funkcji, policzalną analitycznie. Szczegóły tego postępowania zostaną zaraz przedstawione, na razie chciałbym przedstawić kilka komentarzy:

- Podobnie, jak w poprzednim ustępie, przyjąłem sześcienny kształt komórek.
- Jeżeli mamy do czynienia z okresowymi warunkami brzegowymi w dwóch wymiarach (zamiast omawianego tu 1D PBC), to zamiast liniowego rozkładu przyjąć należy powierzchniowy rozkład momentu dipolowego.
- Kwestia błędów wprowadzonych przez powyższe przybliżenie będzie omówiona w ust. 3.4.2.
- Powyższą metodę będę oznaczał jako N^{cont} .

Stosując opisane powyżej przybliżenie, całość obliczania N^{PBC} , przedstawiona schematycznie na Rys. 3-6, przypomina trochę konstrukcję Ewalda [42] – w różnych obszarach stosujemy różne metody obliczeń. Dla tych elementów sumy (3.6), które odpowiadają komórkom leżącym blisko siebie stosujemy metodę N^{cube} , dla komórek średnio odległych stosujemy metodę N^{sphr} , a dla bardzo odległych komórek stosujemy metodę N^{cont} :

$$\begin{aligned}
 N^{\text{PBC}}(i, j, k) = & \sum_{e: \sqrt{i^2 + j^2 + k^2 + (en_z)^2} < R_1} N^{\text{cube}}(i, j, k + en_z) \\
 & + \sum_{f: R_1 \leq \sqrt{i^2 + j^2 + k^2 + (fn_z)^2} < R_2} N^{\text{sphr}}(i, j, k + fn_z) \\
 & + N^{\text{cont}}(i, j, k).
 \end{aligned} \tag{3.11}$$



Rys. 3-6 Schemat liczenia N^{PBC} . Dla małych odległości pomiędzy komórkami stosuję wzory Newella [63] (obszar zielony). Dla większych odległości, przekraczających R_1 , ignoruję geometrię komórek i traktuję je jak jednorodnie namagnesowane kulki (obszar niebieski; patrz ust. 3.3). Dla największych odległości stosuję przybliżenie opisane w ust. 3.4, prowadzące do wzorów analitycznych na sumę rozciągającą się do nieskończoności. Granica obszarów określona przez promień R_2 może być zdefiniowana przez podanie wartości indeksu g . Rysunek z pracy [79].

3.4.1 Wzór analityczny na N^{cont}

$N^{\text{cont}}(i, j, k)$ jest przybliżeniem nieskończonej sumy^{*}:

$$\sum_{h=g}^{\infty} N^{\text{sphr}}(i, j, k + hn_z) + \sum_{h=-g}^{-\infty} N^{\text{sphr}}(i, j, k + hn_z), \quad (3.12)$$

gdzie indeks graniczny, $g(R_2)$, jest funkcją promienia R_2 .

Dalszy ciąg rozumowania łatwiej będzie przedstawić w języku pola od magnesowania, jak wiemy z ust. 2.3 powiązanego z namagnesowaniem równaniem $\mathbf{H}_d = -\mathbf{NM}$.

^{*} Najlepiej byłoby, gdyby N^{cont} był „bezpośrednim” przybliżeniem metody N^{prec} . Ponieważ jednak nie jest to proste, pozostanę przy równaniu (3.12). Uwzględnię to jednak analizując błędy metody N^{cont} w ust. 3.4.2.

Sumowanie obecne w (3.12) jest równoznaczne obliczeniu nieskończonej sumy dla pola

$\mathbf{H}_d$:

$$\sum_{h=g}^{\infty} \mathbf{H}_d(i, j, k + hn_z) + \sum_{h=-g}^{-\infty} \mathbf{H}_d(i, j, k + hn_z), \quad (3.13)$$

gdzie źródłem pola $\mathbf{H}_d$ są dipole punktowe. Pole od magnesowania w odległości $\mathbf{r}$ od dipola o momencie magnetycznym $V_{el}\mathbf{M}$ jest zgodne ze wzorem

$$\mathbf{H}_d(\mathbf{r}) = \frac{3\mathbf{r}(V_{el}\mathbf{M} \cdot \mathbf{r}) - V_{el}\mathbf{M}|\mathbf{r}|^2}{4\pi|\mathbf{r}|^5}. \text{ Od tego momentu skorzystam z faktu jednostkowego}$$

rozmiaru rozważanej komórki. Zatem: $n_z = d$ oraz $V_{el} = 1$. Dalej, komórka dla której $(i, j, k) = (0, 0, 0)$ jest tak dobrana, by wszystkie indeksy $i/j/k$ były nieujemne. Zdefiniujmy funkcję pomocniczą $\mathbf{f}(z)$ jako:

$$\mathbf{f}(z) = \frac{1}{4\pi d} \frac{3(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}_z z)(\mathbf{M} \cdot (\mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}_z z)) - \mathbf{M}|\mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}_z z|^2}{|\mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}_z z|^5}. \quad (3.14)$$

Przybliżenie liniowego rozkładu momentu dipolowego jest równoznaczne zastąpieniu sumy ze wzoru (3.13) odpowiednią całką:

$$\begin{aligned} \sum_{h=g}^{\infty} \mathbf{H}_d(i, j, k + hd) + \sum_{h=-g}^{-\infty} \mathbf{H}_d(i, j, k + hd) \\ \approx \int_{d(g-1/2)}^{\infty} \mathbf{f}(z)dz + \int_{d(-g+1/2)}^{-\infty} \mathbf{f}(z)dz \stackrel{\text{def}}{=} -\mathbf{N}^{\text{cont}}\mathbf{M}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Całka $\int \mathbf{f}(z)dz$ może być obliczona analitycznie. W rezultacie, we wzorze (3.15)

pojawiają się kombinacje składowych wektora $\mathbf{M}$. A ponieważ $\mathbf{H}_d = -\mathbf{N}\mathbf{M}$, to można

stąd odwikłać wzory na elementy tensora $\mathbf{N}^{\text{cont}}$ (przypadek $(i, j) = (0, 0)$ dla N_{xx}^{cont} i N_{xy}^{cont}

jest rozważony oddzielnie poniżej; ponieważ jesteśmy zainteresowani stosunkowo dużymi wartościami R_2 , to przyjąłem $g > k/d + 1/2$, czyli $g \geq 2$):

$$\begin{aligned}
N_{xx}^{\text{cont}}(i, j, k) &= \frac{(j^2 - i^2)}{4\pi d(i^2 + j^2)^2} \\
&\quad \left(2 + \frac{k + d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k + d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \left(j^2 + \frac{2i^4}{i^2 - j^2} + (k + d(\frac{1}{2} - g))^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{k - d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k - d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \left(j^2 + \frac{2i^4}{i^2 - j^2} + (k - d(\frac{1}{2} - g))^2 \right) \right), \\
N_{xy}^{\text{cont}}(i, j, k) &= \frac{-ij}{4\pi d(i^2 + j^2)} \\
&\quad \left(\frac{4}{i^2 + j^2} + \frac{k + d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k + d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \left(3 + \frac{2(k + d(\frac{1}{2} - g))^2}{i^2 + j^2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{k - d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k - d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \left(3 + \frac{2(k - d(\frac{1}{2} - g))^2}{i^2 + j^2} \right) \right), \\
N_{xz}^{\text{cont}}(i, j, k) &= \frac{i}{4\pi d} \\
&\quad \left(\frac{1}{(i^2 + j^2 + (k + d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} - \frac{1}{(i^2 + j^2 + (k - d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \right), \\
N_{zz}^{\text{cont}}(i, j, k) &= \frac{1}{4\pi d} \\
&\quad \left(\frac{k + d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k + d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} - \frac{k - d(\frac{1}{2} - g)}{(i^2 + j^2 + (k - d(\frac{1}{2} - g))^2)^{3/2}} \right), \\
N_{yy}^{\text{cont}}(i, j, k) &= N_{zz}^{\text{cont}}(j, i, k), \\
N_{yz}^{\text{cont}}(i, j, k) &= N_{xz}^{\text{cont}}(j, i, k).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Tensor odmagnesowania jest symetryczny, tę samą własność posiada też $\mathbf{N}^{\text{PBC}}$, dlatego podałem wzory tylko na sześć elementów tensora $\mathbf{N}^{\text{cont}}$. Elementy N_{xx}^{cont} i N_{xy}^{cont} mają następującą postać dla szczególnego przypadku gdy $i = j = 0$ (wtedy niektóre mianowniki ze wzorów (3.16) równają się zero):

$$\begin{aligned}
N_{xx}^{\text{cont}}(0, 0, k) &= \frac{1}{8\pi d} \left(\frac{1}{(k + d(\frac{1}{2} - g))^2} + \frac{1}{(k - d(\frac{1}{2} - g))^2} \right), \\
N_{xy}^{\text{cont}}(0, 0, k) &= 0.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

3.4.2 Błędy związane z metodą N^{cont}

Rozważania przedstawione w ust. 3.3 pozwalają na kontrolę błędów dla wyników N^{cube} i N^{sphr} . Poniżej przedstawię wzory będące podstawą do kontroli błędu metody N^{cont} , błędu zdefiniowanego analogicznie do δN^{cube} i δN^{sphr} (3.9) jako:

$$\delta N^{\text{cont}} = \left| N^{\text{cont}} - \sum N^{\text{prec}} \right|, \quad (3.18)$$

patrz też wzory (3.11) i (3.12). Błąd ten oszacuję od góry:

$$\delta N^{\text{cont}} \leq \left| N^{\text{cont}} - \sum N^{\text{sphr}} \right| + \left| \sum N^{\text{sphr}} - \sum N^{\text{prec}} \right|. \quad (3.19)$$

Zwracam uwagę, że zarówno δN^{cont} , jak i N^{cont} odpowiadają sumie wielu obrazów, w przeciwieństwie do przyjętych definicji dla δN^{cube} , δN^{sphr} , N^{cube} i N^{sphr} . Drugi składnik prawej części równania (3.19) można oszacować od góry znając współczynniki podane we wzorach (3.10): $\left| \sum N^{\text{sphr}} - \sum N^{\text{prec}} \right| \leq \sum \left| N^{\text{sphr}} - N^{\text{prec}} \right| = \sum \delta N^{\text{sphr}}$. Pozostaje do obliczenia pierwszy składnik. Oszacuję go stosując dwukrotnie rozwinięcie na szereg Taylora. Schemat tego postępowania przedstawię na przykładzie elementu xy . Najpierw zastosuję rozwinięcie dla indeksu h , wokół nieskończoności. Krok ten ma na celu uproszczenie wzorów na N^{sphr} :

$$\begin{aligned} & \left| N_{xy}^{\text{cont}} - \sum N_{xy}^{\text{sphr}} \right| \\ &= \left| N_{xy}^{\text{cont}}(i, j, k) - \left(\sum_{h=g}^{\infty} N_{xy}^{\text{sphr}}(i, j, k + hd) + \sum_{h=-g}^{-\infty} N_{xy}^{\text{sphr}}(i, j, k + hd) \right) \right| \\ &= \left| N_{xy}^{\text{cont}}(i, j, k) - \frac{ij}{\pi} \sum_{h=g}^{\infty} \left(\frac{3}{2d^5} h^{-5} + \frac{15(i^2 + j^2 - 6k^2)}{4d^7} h^{-7} + O(h^{-9}) \right) \right|. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Teraz, należy zastosować rozwinięcie na szereg Taylora funkcji digamma* (biorącej się z sumowania elementów $\sum_{h=g}^{\infty} h^{-k}$) dla indeksu g . Równolegle zastosuję rozwinięcie dla

* Funkcja digamma, Ψ , jest powiązana z funkcją gamma Eulera, Γ , zależnością: $\Psi(z) = \Gamma'(z) / \Gamma(z)$.

N^{cont} , też dla parametru g – patrz wzory (3.16); w tym momencie elementy proporcjonalne do g^{-4} i g^{-5} skracają się, a element proporcjonalny do g^{-6} ulega uproszczeniu. W rezultacie otrzymam:

$$N_{xy}^{\text{cont}} - \sum N_{xy}^{\text{sphr}} = \frac{-5ij}{16\pi d^5} g^{-6} + O(g^{-7}) \quad (3.21)$$

Stosując takie postępowanie można otrzymać poniższe wzory:

$$\begin{aligned} N_{xx}^{\text{cont}} - \sum N_{xx}^{\text{sphr}} &= \frac{1}{16\pi d^3} g^{-4} + O(g^{-5}), \\ N_{xy}^{\text{cont}} - \sum N_{xy}^{\text{sphr}} &= \frac{-5ij}{16\pi d^5} g^{-6} + O(g^{-7}), \\ N_{xz}^{\text{cont}} - \sum N_{xz}^{\text{sphr}} &= \frac{5ik}{4\pi d^5} g^{-6} + O(g^{-7}), \\ N_{zz}^{\text{cont}} - \sum N_{zz}^{\text{sphr}} &= \frac{-1}{8\pi d^3} g^{-4} + O(g^{-5}), \\ N_{yy}^{\text{cont}} - \sum N_{yy}^{\text{sphr}} &= \frac{1}{16\pi d^3} g^{-4} + O(g^{-5}), \\ N_{yz}^{\text{cont}} - \sum N_{yz}^{\text{sphr}} &= \frac{5jk}{4\pi d^5} g^{-6} + O(g^{-7}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.5 Kontrola błędów

Jak wiemy z ust. 3.3, tensor N^{PBC} jest liczony trzema metodami, w zależności od rozważanego obszaru, patrz Rys. 3-6. Wynika stąd, że na całkowity błąd tensora, δN , składają się: i) błędy numeryczne pojawiające się w metodzie N^{cube} , (Rys. 3-5, punkty czerwone), ii) błędy metody wynikające ze stosowania przybliżenia N^{sphr} (Rys. 3-5, punkty niebieskie), oraz iii) błędy metody wynikające ze stosowania przybliżenia N^{cont} . Promień R_1 należy dobrać tak, by zbalansować błędy typu i) i ii) (Rys. 3-5). Promień R_2 należy dobrać w oparciu o analizę błędów N^{cont} . W zaproponowanej przeze mnie implementacji, analiza ta opiera się na porównaniu błędu $\delta N_{\alpha\beta}^{\text{cont}}$ (obliczonego zgodnie z ust. 3.4.2) z aktualną wartością elementu $N_{\alpha\beta}$. Jeżeli indeks g z równań (3.22) będzie odpowiednio duży, wtedy błąd δN^{cont} będzie odpowiednio mały. Promień R_2 , będący

funkcją g , można zatem szukać narzucając warunek* $\delta N_{\alpha\beta}^{\text{cont}} / N_{\alpha\beta} < \varepsilon$ i testując go dla coraz większych wartości g . Stosując takie podejście można wykonywać obliczenia mniej dokładne, przyjmując większe ε , jeżeli np. czas obliczeń jest sprawą krytyczną. Z drugiej strony można wykonywać obliczenia z precyzją ograniczoną tylko przez dostępny sprzęt, jeżeli przyjmiemy odpowiednio małe ε . Na przykład, jeżeli mamy do dyspozycji 15 cyfr znaczących, to nie ma sensu stosowanie ε mniejszego niż 10^{-15} , bo np. operacja $1 + 10^{-16}$ nadal daje w wyniku 1. Nie można natomiast wykluczyć, że zależność $\delta N(\varepsilon)$, którą będę analizować w następnym rozdziale, zacznie się nasycać dla ε większego niż 10^{-15} (np. na skutek akumulacji błędów numerycznych).

3.6 Podsumowanie

Zastosowanie okresowych warunków brzegowych w modelowaniu zjawisk mikromagnetycznych jest najtrudniejsze dla oddziaływań dipolowych, ze względu na ich długozasięgowy charakter. Większość prezentowanych w literaturze wyników (korzystających z PBC) opiera się na obcięciu zasięgu tego oddziaływania powyżej pewnego promienia. Zaproponowana przeze mnie metoda jest pozbawiona tej wady. Jej sedno przedstawia Rys. 3-6: PBC w oddziaływaniach dipolowych są uwzględnione poprzez uogólniony tensor odmagnesowania, N^{PBC} , który jest liczony jako suma składników N^{cube} i N^{sphr} ; do tej sumy jest dodany N^{cont} , czemu odpowiada uwzględnienie nieskończonego zasięgu oddziaływania dipolowego. Dzięki analizie błędów powstających na każdym etapie tego procesu można podać jednoznaczny sposób wyboru promieni granicznych R_1 i R_2 . Promień R_1 jest wielkością stałą wynikającą z analizy przedstawionej na Rys. 3-5, natomiast wartość R_2 jest ustalana w

* Ten algorytm można stosować tylko wtedy, gdy $N_{\alpha\beta} \neq 0$. Postępowanie w przypadku $N_{\alpha\beta} = 0$ jest opisane w ust. 6.2.

sposób dynamiczny, w zależności od wartości elementu tensora dla danej pary oddziałujących komórek i parametru ε , czyli akceptowanego błędu.

Jak łatwo zauważyć, istotą pomysłów przedstawionych w ust. 3.3 i 3.4 jest rozwijanie w szereg Taylora. Wynika stąd możliwość dalszego rozwijania przedstawionej metody poprzez uwzględnienie dalszych czynników rozwinięcia w celu przyspieszenia działania programu i/lub uzyskania dokładniejszych wyników. Doświadczenie autora wskazuje, że „dokładne” uwzględnianie PBC, przy zastosowanie odpowiednio małego parametru akceptowalnego błędu, (ε z zakresu $10^{-12}..10^{-10}$, patrz ust. 4.3), nie przedłuża obliczeń w znaczący sposób. Uwzględnienie wyższych potęg rozwinięcia na szereg Taylora może być już jednak konieczne dla PBC w dwóch wymiarach lub dla komórek nie będących sześcianami (patrz poniżej).

Przedstawiony przeze mnie w tym rozdziale opis bazował na paru upraszczających założeniach. Chciałbym się do nich tu krótko odnieść.

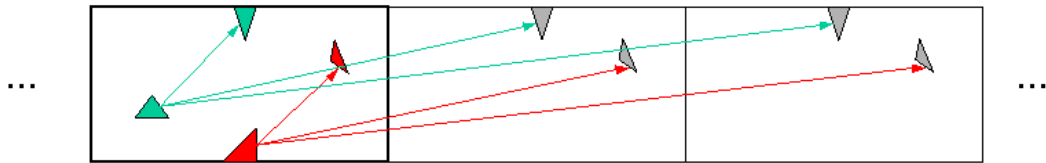
1. Sześcienny kształt komórek siatki dyskretyzacji

Wybór konkretnego kształtu komórki wpływa głównie na rezultaty przedstawione na Rys. 3-5. Można się spodziewać, że dla prostopadłościennych (nie-kubicznych) komórek, promień R_1 będzie większy, gdyż przybliżenie dipoli punktowych będzie „dobrze pracować” dopiero dla większych odległości. Owszem, analiza Donahue sugeruje [82], że w tym wypadku zależność błędu δN^{sphr} od odległości byłaby słabsza: $\delta N^{\text{sphr}}(r) \propto r^{-5}$, podczas gdy dla kubicznych komórek mamy $\delta N^{\text{sphr}}(r) \propto r^{-7}$ (patrz też (3.10)). Analiza Donahue opiera się jednak na analitycznym badaniu szeregu Taylora, więc nie może być podstawą do wyznaczenia współczynników B z równania (3.10), zatem nie można też wyznaczyć wartości R_1 . Jest to niewygodne, gdyż można podejrzewać że wartości B oraz R_1 będą zależeć od konkretnego kształtu komórki (np., im komórka jest bliższa kształtem do kubicznej, tym R_1 jest mniejsze). Czyli w wypadku komórek nie będących sześcianami trzeba by analizę z ust. 3.3 powtarzać dla każdego rozważanego kształtu, czyli stosunku boków prostopadłościennej komórki. Byłby to proces żmudny, chociaż w pełni wykonalny.

2. Regularność siatki podziału

Przedstawioną metodę można zastosować i do nieregularnych siatek podziału. Co prawda, w takim wypadku trzeba oddzielnie traktować wszystkie pary komórek, nawet jeżeli mają one podobne relatywne położenie – dlatego, że tym razem każda komórka może mieć inny kształt. Nie zmienia to jednak idei, by dla większych odległości oddziaływanie pomiędzy komórkami przybliżać oddziaływaniem dipoli punktowych, a dla jeszcze większych – rozkładem ciągłym. Faktem jest natomiast, że zgodnie z umówionym powyżej punktem 1, wyznaczenie promienia R_1 mogłoby być w takim przypadku skomplikowane (być może trzeba by to robić oddzielnie dla każdej pary komórek).

Patrz Rys. 3-7.



Rys. 3-7 Schemat uwzględnienia okresowych warunków brzegowych w jednym wymiarze dla nieregularnej siatki podziału. Dla czerwonej pary oddziałujących dipolowo komórek, oddziaływanie z obrazami zaznaczyłem czerwonymi strzałkami. Analogicznie, dla zielonej pary komórek. Strzałki na tym rysunku pokazują odległości względne komórek w sposób symboliczny.

3. Okresowe warunki brzegowe w dwóch wymiarach

W takim przypadku liczenie N^{cont} powinno odzwierciedlać nie liniowy lecz dwuwymiarowy, powierzchniowy rozkład momentu dipolowego. A ponieważ całka powierzchniowa $\iint r^{-3} d^2 r$ jest skończona, nie stanowi to dużego problemu.

Pewne numeryczne trudności mogą się pojawić przy sumowaniu elementów N^{cube} i N^{sphr} ze względu na ich potencjalnie dużą liczbę. W tej sytuacji kontrolowanie błędów i stosowanie parametru akceptowalnych błędów, ϵ , (ust. 3.5) może być jeszcze ważniejsze, niż w przypadku 1D PBC. Konieczne może się okazać w takim wypadku korzystanie z wyższych potęg rozwinięcia na szereg Taylora.

4. Periodyczne warunki brzegowe w trzech wymiarach

Problem periodycznych warunków brzegowych w trzech wymiarach wiąże się z całką objętościową $\iiint r^{-3} d^3r$ lub z sumowaniem po całej przestrzeni

$$\sum_{i,j,k} a_{ijk} r_{ijk}^{-3}, \text{ gdzie } i, j, k \text{ są indeksami numerującymi komórki wzdłuż osi } x, y, z.$$

Niektóre elementy a_{ijk} mogą być ujemne a inne dodatnie. W rezultacie przy przyjęciu odpowiedniej kolejności sumowania, taka suma może być obliczona.

Ale tak otrzymany wynik jest niepewny, bo może on zależeć od kolejności sumowania – szereg ten nie jest bezwzględnie zbieżny. Problematyka

periodycznych warunków brzegowych będzie omówiona szerzej w pracy [79].

Reasumując, przedstawiona przeze mnie metoda jest ogólna i nie jest ograniczona upraszczającymi założeniami przyjętymi w tej pracy.

4 Wyniki i zastosowania przedstawionej metody

Przedstawię teraz zastosowania metody opisanej w pierwszej części pracy. W oparciu o zaproponowany przeze mnie algorytm, napisałem w języku C++ moduł będący rozszerzeniem publicznie dostępnego programu OOMMF [28] (szczegóły: patrz ust. 6.2). Program OOMMF powstał w National Institute of Standards and Technology (NIST), USA. Jest on darmowy, można go pobrać ze strony WWW <http://math.nist.gov/oommf>. Program OOMMF jest rozwijany już od paru lat, przez pracowników NIST i nie tylko (praca przedstawiona w niniejszej rozprawie jest skromną tego częścią), jest on również na bieżąco poprawiany. Wykorzystanie napisanego wcześniej programu do modelowania numerycznego ma szereg zalet:

- Program o tak szerokiej bazie użytkowników^{*} musi, z natury, być dobrze udokumentowany. Zatem mogłem się w mojej pracy skupić na temacie głównym niniejszej pracy, a nie na odkrywaniu od nowa rzeczy dawno odkrytych.
- Duża liczba osób korzystających z takiego programu pozwala mieć nadzieję, że i mój moduł będzie wykorzystywany przez innych. Stworzona przeze mnie implementacja jest dostępna publicznie pod adresem <http://info.ifpan.edu.pl/~lebecki/pbc>, odnośnik do tej strony znajduje się na oficjalnych stronach OOMMF.
- Stała opieka autorów nad OOMMF, jak i uwagi od szerokiego grona użytkowników ułatwiają identyfikację błędów. Rzeczywiście, dzięki informacjom zwrotnym od użytkowników mój moduł jest rozwijany/poprawiany na bieżąco.
- Kontakt z jednym z autorów programu OOMMF, Michaeliem Donahue, miał bardzo stymulujące znaczenie przy powstawaniu niniejszej pracy.

^{*} Liczba publikacji, w których mowa jest o korzystaniu z programu OOMMF na dzień pisanie tej pracy przekracza 500, patrz strona http://math.nist.gov/oommf/oommf_cites.html.

Opisane poniżej zastosowania można podzielić na porównania z przewidywaniami teoretycznymi, mające głównie na celu testowanie poprawności implementacji, i na analizę dostępnych wyników doświadczalnych. Każdy z przedstawionych poniżej podrozdziałów składa się z oddzielnego wstępu opisującego szczegóły odpowiedniej teorii lub doświadczenia. Dopiero potem jest przedstawiony opis modelowania, przeprowadzonego samodzielnie przeze mnie. Ostatni ustęp, 4.5, pokazuje, że periodyczne warunki brzegowe mogą być pomocne nie tylko przy modelowaniu struktur kwazijednowymiarowych.

4.1 Nieskończony drut o przekroju kołowym

Koercja dla nieskończonego drutu o przekroju kołowym jest ciekawym problemem z dwóch powodów. Po pierwsze, możemy ten przypadek rozwiązać analitycznie. Po drugie, otrzymane w wyniku hodowli nanodruły mają przekrój kołowy i często silnie podłużny kształt. Dzięki temu, badania nad takimi strukturami pozwalają porównać dostępną teorię z wynikami doświadczalnymi.

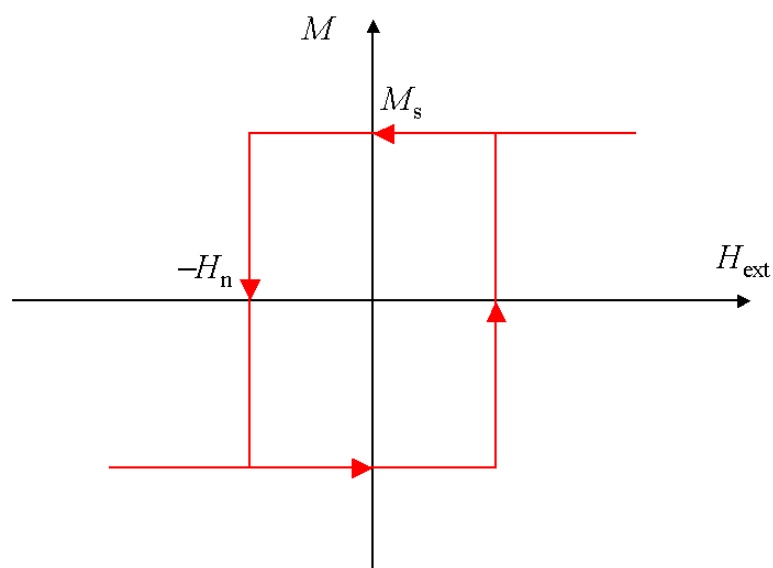
4.1.1 Teoria Frei i Aharoniego

Przedstawię tu opisaną przez Frei [83], a poprawioną przez Aharoniego [84] teorię dla nieskończonego drutu ferromagnetycznego. Taki drut ma łatwą oś namagnesowania zgodną z kierunkiem jego osi^{*} – jeżeli zaniedbamy anizotropię magnetokrystaliczną. Jeżeli drut jest skierowany wzdłuż osi z , to stanem o najniższej energii będzie jednorodne namagnesowanie drutu w kierunku $+z$ lub $-z$ (przy braku zewnętrznego pola). Wtedy bowiem wkłady do energii pochodzące od omówionych w ust. 2.1

^{*} Pisząc „oś drutu” albo „oś rurki” mam zawsze na myśli oś symetrii C_{∞} .

oddziaływań są najmniejsze: energia oddziaływania wymiennego jest równa zero (bo $\text{grad}(\mathbf{M}) = 0$), tak samo energia oddziaływania dipolowego (bo $N_{zz} = 0$, a próbka ma kształt elipsoidalny, patrz ust. 2.3) – zwracam uwagę, że obie energie są z natury nieujemne, patrz wzór (2.4) i równanie (3-45) z książki Browna [23]. Taka tendencja jest często określana terminem „anizotropia kształtu”. Jeżeli przykładamy zewnętrzne pole $\mathbf{H}_{\text{ext}}$, równoległe do osi z , i skierowane przeciwnie do kierunku namagnesowania próbki, to dla odpowiednio dużej wartości tego pola mamy do czynienia ze zjawiskiem nukleacji zachodzącej w całej objętości drutu i skutkującej skokowym przełączeniem kierunku namagnesowania. Pole dla którego zachodzi to zjawisko jest nazywane polem nukleacji i oznaczane jako H_n . Aharoni pole nukleacji definiuje jako „pole, dla którego początkowy stan nasycenia $\mathbf{M} = (0, 0, \pm M_s)$ zaczyna być niestabilny i jest w stanie przejść jakakolwiek zmiana namagnesowania” ([50], str. 184). Dla nieskończonego drutu pętla histerezy ma kształt prostokątny, a pole nukleacji można utożsamiać z polem koercji, patrz ^{*} Rys. 4-1.

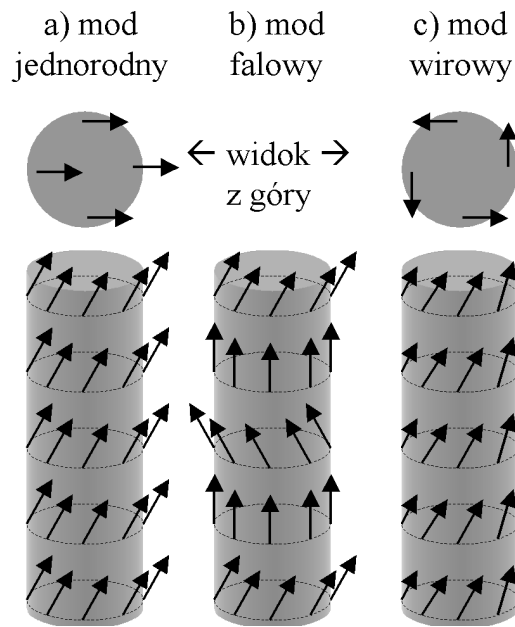
^{*} Zarówno koercję, jak i pole nukleacji definiuję tak, że ich wartości są dodatnie.



Rys. 4-1 Pętla histerezy dla nieskończonego ferromagnetycznego drutu. Rysunek schematyczny, pole zewnętrzne $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ jest przyłożone wzdłuż drutu.

Wspomniana teoria przewiduje dwa możliwe mody nukleacji (ang. *nucleation mode*) czyli rozkłady/dystrybucje namagnesowania prowadzące do przełączenia $\mathbf{M}$. Dla drutów o większej średnicy jest to mod wirowy* (ang. *curling mode*), gdzie namagnesowanie w obrębie drutu ma oprócz składowej równoległej do jego osi także składowa styczną do powierzchni, a prostopadłą do osi – patrz Rys. 4-2 c).

* Ewentualne skojarzenie określenia „mod wirowy” z układem namagnesowania typu *vortex* nie jest wcale bezpodstawne: składowa styczna do powierzchni jest najsilniejsza przy brzegu drutu, w środku ona zanika i zostaje tylko składowa w kierunku z.



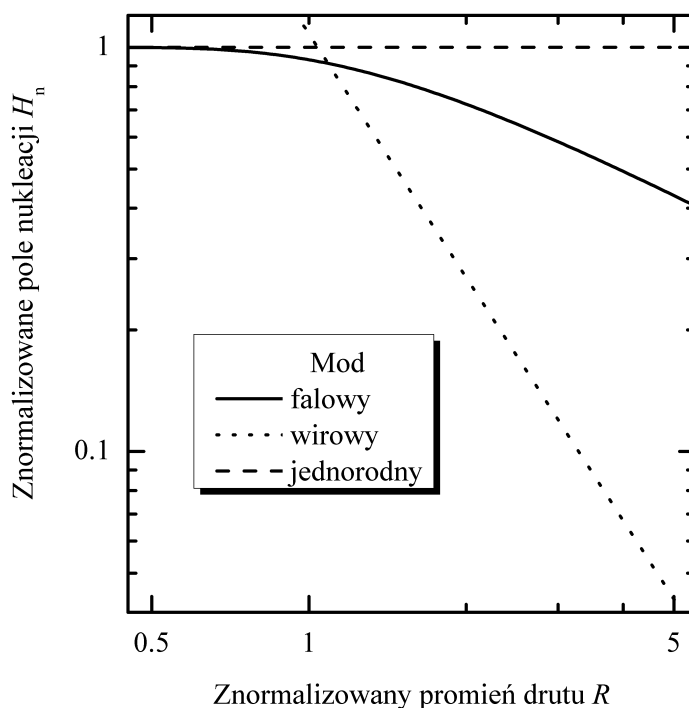
Rys. 4-2 Mody nukleacji omawiane w teorii nieskończonego ferromagnetycznego drutu o przekroju kołowym [83, 84]. (b) Dla cieńszych drutów nukleacja następuje w formie periodycznego układu namagnesowania. (c) Dla grubszych drutów mamy do czynienia z modem wirowym. Często mod falowy jest przybliżany nukleacją jednorodną (a). Rysunek schematyczny.

Dla drutów o mniejszej średnicy preferowany jest mod falowy (ang. *buckling mode*), gdzie namagnesowanie jest funkcją tylko zmiennej z i jest stałe dla danego przekroju drutu płaszczyzną równoległą do płaszczyzny xy . Charakterystyczną cechą tego modu jest jego periodyczna^{*} zależność od zmiennej z – Rys. 4-2 b). Analiza modu falowego jest jednak skomplikowana i często jako jego przybliżenie rozważa się mod jednorodny (ang. *coherent mode*)[†] – Rys. 4-2 a). W opisie stosuje się następujące normalizowanie upraszczające analizę: pole zewnątrz jest normalizowane czynnikiem $\frac{1}{2}\mu_0 M_s$, natomiast promień drutu – czynnikiem $\sqrt{2\pi}\lambda_{ex}$. Po zastosowaniu tych podstawień

^{*} Główna różnica pomiędzy pracami Frei oraz Aharoniego dotyczy właśnie kształtu trybu falowego. Aharoni zwraca uwagę, że kształt sinusoidalny jest tylko przybliżeniem dokładnego rozwiązania. Jednak te różnice nie wpływają znacząco na obliczoną koercję, są one rzędu 1%.

[†] Zrezygnowałem z dosłownego tłumaczenia angielskiej nazwy tego modu jako mod spójny (koherentny). Uważam, że określenie „jednorodny” lepiej oddaje jego istotę, a mianowicie brak przestrzennej zmienności namagnesowania, $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \text{const}$.

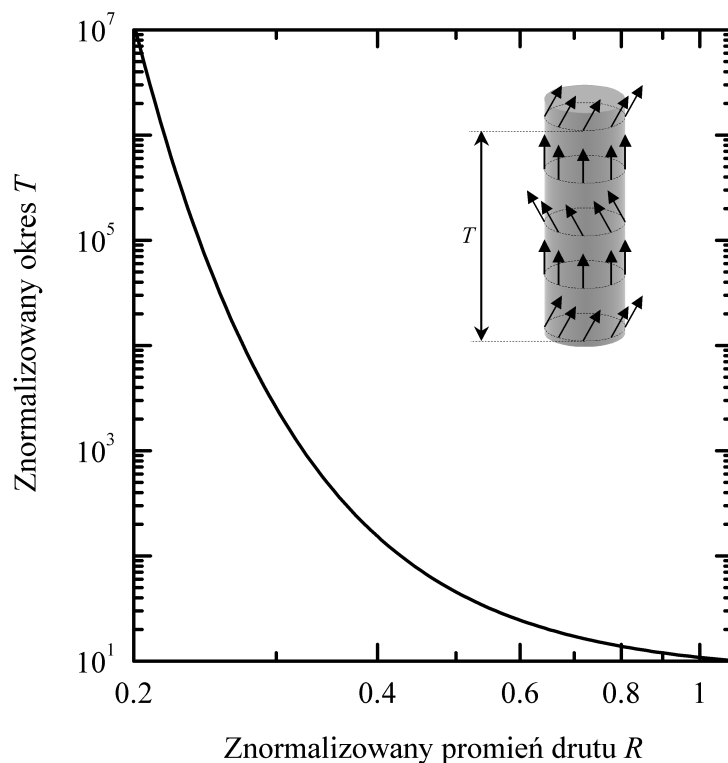
zarówno znormalizowany promień, R , jak i pole nukleacji, H_n , stają się wielkościami bezwymiarowymi. Pole nukleacji obliczone dla każdego z wymienionych trybów jest pokazane na Rys. 4-3.



Rys. 4-3 Pole nukleacji (równoważne koercji), H_n , dla nieskończonego ferromagnetycznego drutu w funkcji jego promienia, R . Obie wielkości, R i H_n , są bezwymiarowe. Poszczególne krzywe odpowiadają różnym modom nukleacji. Wyniki teorii przedstawionej w pracach [83, 84].

Dla modu jednorodnego pole nukleacji nie zależy od promienia: $H_n(R) = 1$, natomiast dla modu wirowego zależność jest odwrotnie kwadratowa: $H_n(R) \propto R^{-2}$. Dla modu falowego funkcja $H_n(R)$ jest skomplikowana, w każdym razie dla małych promieni pole nukleacji dąży do jedności: $\lim_{R \rightarrow 0} H_n(R) = 1$. Powyższy rysunek należy rozumieć w następujący sposób: dla dużych promieni ($R \gtrsim 1.1$), pole nukleacji dla modu wirowego jest najmniejsze. Oznacza to, że przełączanie będzie zachodzić właśnie w tym trybie (patrz [50], rozdz. 9.1). Z kolei, dla mniejszych promieni ($R \lesssim 1.1$), pole nukleacji modu

falowego jest najmniejsze i taki właśnie będzie preferowany profil namagnesowania w momencie nukleacji. Na Rys. 4-3 zazaczyłem też wynik dla modu jednorodnego. Jak widać jego pole nukleacji jest zawsze większe od H_n dla modu falowego. Okres periodyczności modu falowego, znormalizowany tak samo jak promień, jest pokazany na Rys. 4-4.



Rys. 4-4 Okres rozkładu namagnesowania (wzdłuż osi drutu) dla modu falowego. Wartości okresu są znormalizowane w taki sam sposób, jak i promienia R .

Widać szybki wzrost tego okresu dla coraz mniejszych promieni drutu, co wraz ze stosunkowo dużymi wartościami tego okresu uzasadnia traktowanie modu jednorodnego jako przybliżenie modu periodycznego.

4.1.2 Modelowanie

Poprawne modelowanie nieskończonego drutu wymagało uwzględnienia szeregu czynników, opisanych poniżej.

- Nieskończony charakter badanej struktury uwzględniłem poprzez narzucenie okresowych warunków brzegowych wzdłuż drutu (wzdłuż osi z). Korzystałem z własnego modułu opisanego w dodatku 6.2.
- Brak zależności rozkładu namagnesowania dla modu jednorodnego i wirowego od zmiennej z wskazuje na możliwość stosowania długości modelowania równej rozmiarowi jednej komórki dyskretyzacji. Kilka testów przeprowadzonych dla większych długości modelowania potwierdziło taką tezę. Z kolei przewidywana okresowość modu falowego (Rys. 4-4) sugeruje konieczność stosowania zadanej długości modelowania*. W celu sprawdzenia tego przeprowadziłem porównawcze modelowanie dla próbki dłuższej i krótszej, niż przewidziany okres.
- W modelowaniu mikromagnetycznym często stosuje się tzw. pole dodatkowe. W moich analizach stosowałem pole dodatkowe w postaci odchylenia kierunku przyłożonego pola od osi z o ok. jeden stopień oraz jako statyczne w czasie, zmienne w przestrzeni (od komórki do komórki) losowe pole o stałej wielkości $|\mu_0 \mathbf{H}_{\text{offset}}| = 1 \text{ mT}$. Szczegóły tego podejścia, jak i ogólną kwestię potrzeby stosowania pola dodatkowego opisałem w dodatku 6.1.
- Przyjąłem stałe materiałowe bliskie wartościom podawanym w literaturze dla niklu: $M_s = 0.49 \text{ MA/m}$, $A = 9.604 \text{ pJ/m}$ [85] – zatem $\lambda_{\text{ex}} \approx 8 \text{ nm}$. Wartości materiałowe i tak nie mają decydującego znaczenia, gdyż zgodnie z teorią modelowane pole nukleacji skaluje się zgodnie z ust. 4.1.1.

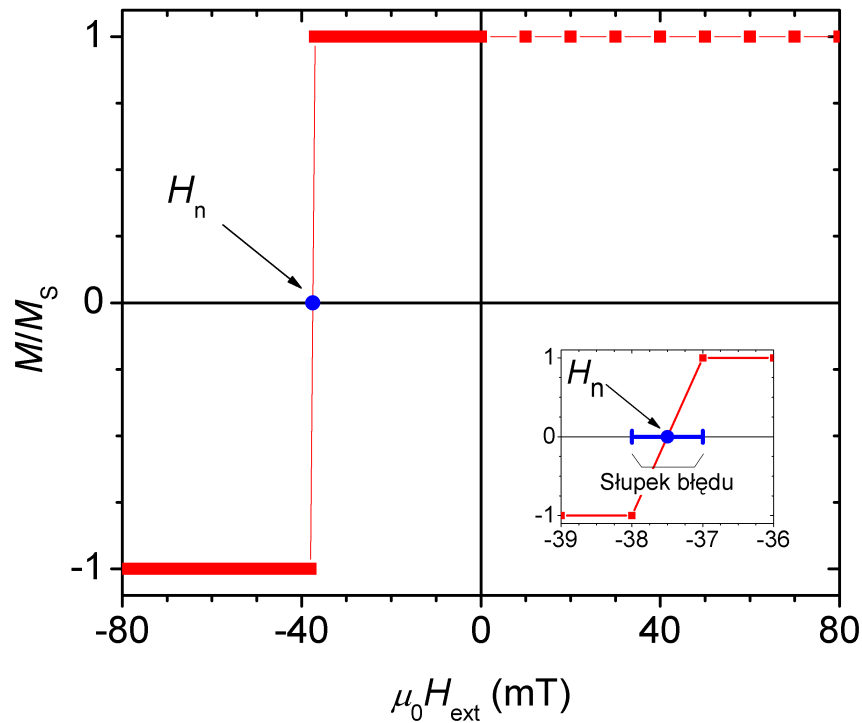
* Stosowanie siatki dyskretyzacji nie pozwala na zupełnie dowolny wybór długości modelowania. Jeżeli np. stosujemy komórki o wielkości $(1 \text{ nm})^3$, to niemożliwe jest modelowanie struktury o długości $10\pi \text{ nm}$ —trzeba przyjąć albo długość 31 nm , albo 32 nm . W praktyce różnice takie okazały się jednak niezauważalne.

- Rozmiar komórek dyskretyzacji należał do przedziału $(0.47 \text{ nm})^3$ — $(5 \text{ nm})^3$. Prawie wszystkie analizy (jedyne wyjątki to przypadki $R = 5$, oraz modelowanie modu falowego dla $R = 1$ i $R = 1/2$) zostały potwierdzone przez ponowne modelowanie dla dwa razy gęstszej siatki. Czyli, za każdym razem szukałem pola H_n z dwukrotnie gęstszą siatką, a jeżeli w rezultacie nie otrzymałem tej samej wartości pola nukleacji (w granicach błędu, patrz opis poniżej), to proces ten był powtarzany. Dla większych promieni wpływ chropowatości powierzchni okazał się bardziej znaczący i tam konieczne było korzystanie z mniejszych komórek.
- Wartość pola H_n wyznaczałem w sposób opisany w następnym punkcie bazując na połowce pętli histerezy (patrz Rys. 4-5). Seria testów wykonana na całej pętli histerezy dała identyczne wyniki, co dla połówek. Procedurę rozpoczynałem od przyłożenia pola $\mu_0 H_{\text{ext}} = +1000 \text{ mT}$, potem pole to było powoli zmniejszane. W momencie rozpoczęcia całego procesu, początkowe namagnesowanie próbki było losowe^{*}.
- W modelowaniu zmuszony byłem korzystać ze skokowych zmian przyłożonego pola i dla każdej z kolejnych wartości badać wartość namagnesowania. W rezultacie schemat przedstawiony na Rys. 4-1 raczej wyglądał tak, jak przedstawia Rys. 4-5 (jak już uprzednio napisałem, modelowałem połówki pętli). Skokowy charakter przełączania manifestował się tym, że dla pewnych dwóch kolejnych wartości przyłożonego pola $H_{\text{ext}}(i)$, $H_{\text{ext}}(i+1)$ namagnesowanie miało przeciwne znaki $M(i) = -M(i+1)$. Koercję definiowałem jako średnią wartość tych pól: $H_n = \frac{H_{\text{ext}}(i) + H_{\text{ext}}(i+1)}{2}$. Niepewność koercji związana ze

$$\text{skokową zmianą przykładanego pola to}^\dagger: \delta H_n = \left| \frac{H_{\text{ext}}(i) - H_{\text{ext}}(i+1)}{2} \right|.$$

^{*} Jest to tzw. „dobra praktyka” modelowania mikromagnetycznego. Błędne jest natomiast przyjmowanie stanu $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = (0,0,M_s)$ jako stanu początkowego, może to wprowadzić do układu niechcianą symetrię i np. zawyżyć otrzymaną koercję – patrz dodatek 6.1.

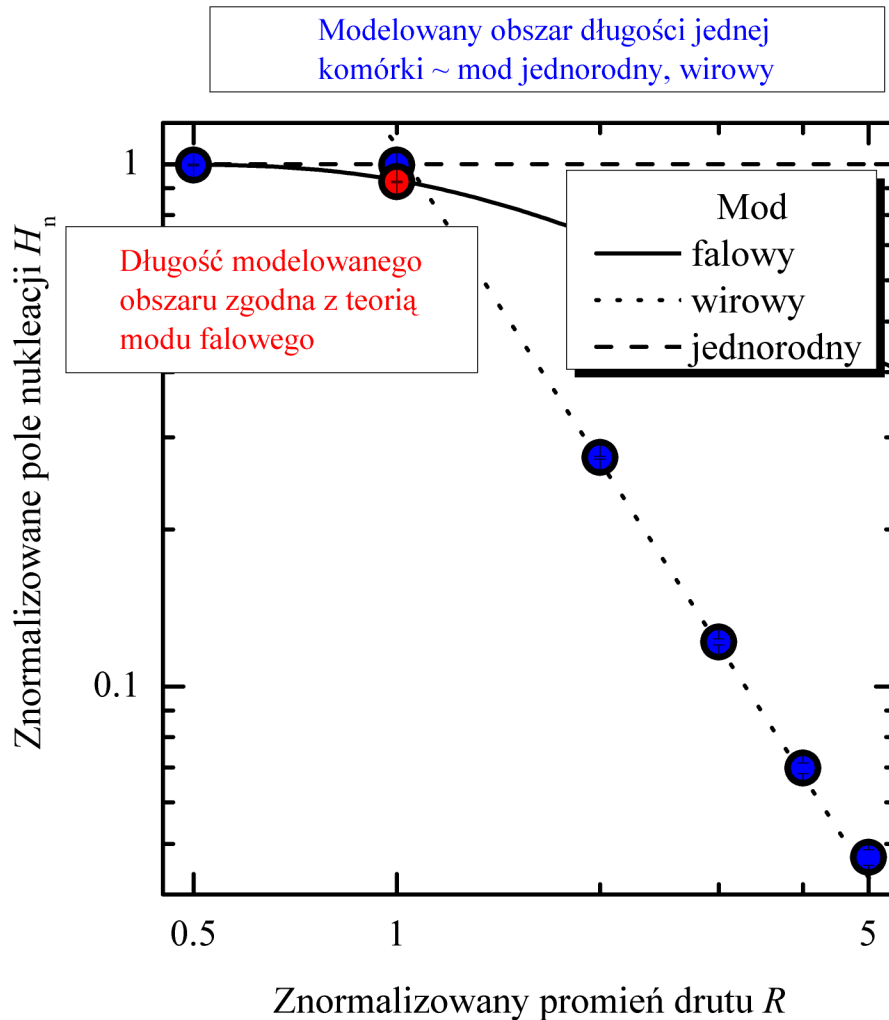
[†] Na całkowitą niepewność modelowanej koercji składa się opisana tu niepewność wynikająca ze skokowej zmiany H_{ext} i niepewność wynikająca z chropowatej powierzchni. Tego drugiego błędu nie potrafię oszacować, mogę go tylko minimalizować wybierając coraz mniejsze rozmiary komórek.



Rys. 4-5 Przykładowy fragment pętli histerezy nieskończonego drutu (bez anizotropii magnetokrystalicznej). Wstawka przedstawia powiększony obszar dla pól bliskich H_n .
 Periodyczne warunki brzegowe są wzdłuż drutu, długość modelowania: 0.625 nm, stałe materiałowe: $M_s = 0.49$ MA/m, $A = 9.604$ pJ/m, rozmiar komórki: $(0.625 \text{ nm})^3$, promień drutu: 80 nm.

- W rozdziale drugim wspomniałem o dwóch zasadniczych metodach poszukiwania rozwiązań przy problemach statycznych (ust. 2.2): szukanie minimum energii i rozwiązywanie równania dynamicznego (2.13). Kilka testów potwierdziło, że w przypadku prezentowanych tu analiz, obie metody dają te same rezultaty. Ponieważ metoda szukania minimum energii zajmuje mniej czasu, tę właśnie metodę stosowałem w opisanym przypadku.

Zgodnie z przedstawionymi powyżej warunkami przeprowadziłem modelowanie nieskończonego ferromagnetycznego drutu. Wyniki tej analizy przedstawione są na Rys. 4-6.



Rys. 4-6 Koercja nieskończonego ferromagnetycznego drutu – porównanie teorii [83, 84] z modelowaniem wykorzystującym periodyczne warunki brzegowe wzdłuż drutu. Punkty niebieskie odpowiadają długości modelowania równej wielkości jednej komórki. Jest to poprawne tylko dla modu jednorodnego i wirowego. Punkt czerwony odpowiada długości modelowania zgodnej z okresem modu falowego. Dla $R = \frac{1}{2}$ modelowanie modu jednorodnego i falowego dało w wyniku tę samą koercję.

Na rysunku tym niebieskimi punktami oznaczone są wyniki otrzymane dla długości modelowania równej rozmiarowi jednej komórki. Jest to poprawne dla modu jednorodnego i falowego – bo mody te nie zależą od zmiennej z . I rzeczywiście, niebieskie punkty układają się zgodnie z teorią dla tych modów. Największe odstępstwo dotyczy przypadku $R = 5$, ale tutaj modelowane wartości nie zostały potwierdzone przez

analizę dla dwa razy mniejszych komórek. Okazało się bowiem, że dla coraz większych promieni drutu, rola gładkości powierzchni jest coraz większa i trzeba stosować coraz mniejsze komórki. Zjawisko takie można wytłumaczyć następująco. Największe odchylenia namagnesowania od kierunku $\pm z$ dla modu wirowego występują przy powierzchni drutu (Rys. 4-2 c), natomiast namagnesowanie w środku drutu jest najmniej odchylone. W tym sensie powierzchnia drutu jest miejscem gdzie zachodzi nukleacja, choć niektórzy termin „nukleacja” rozumieją jako zjawisko lokalne ([50], str. 184). Dalej, skoro dla rosnącego promienia drutu nukleacja następuje „szybciej” – dla mniejszych przyłożonych pól, to można to określić jako rosnącą rolę powierzchni w nukleacji. A zatem, dla coraz większych promieni drutu rola gładkości powierzchni może mieć coraz większe znaczenie.

Odrębną analizę przeprowadziłem dla modu falowego. Tutaj, aby być w zgodzie z teorią, rozmiar modelowanej struktury musiał być zgodny z przewidywanym okresem (ust. 4.1.1, Rys. 4-4). Tak przeprowadzona analiza daje w efekcie koercję zgodną z przewidywaniami teorii dla modu falowego – patrz czerwony punkt na Rys. 4-6. Przeprowadziłem dalsze testy i założyłem, że długość modelowania jest trochę większa lub trochę mniejsza od teoretycznie przewidzianego okresu. W rezultacie otrzymałem większe wartości koercji w porównaniu z teorią modu falowego. Nic dziwnego: teoria przecież przewiduje, że profil o kształcie sinusoidalnym i danym okresie (Rys. 4-4) ma najniższe możliwe pole nukleacji (dla danego promienia). Przedstawione rozumowanie jest analogią do podobnych rozważań zaprezentowanych w pracy Ferre ([86], Rys. 2). W przeciwieństwie jednak do Ferre, przedstawione przeze mnie wyniki są dużo bardziej zgodne z teorią analityczną.

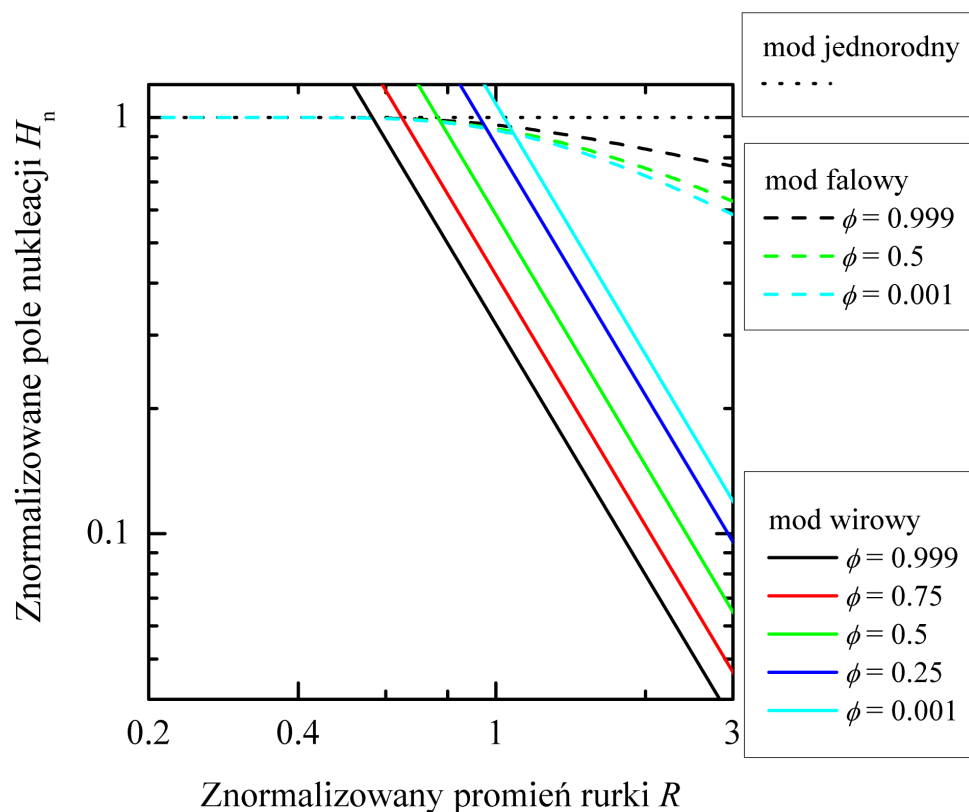
4.2 Nieskończona rurka o przekroju kołowym

Teoria dla nieskończonej rurki, choć znana już od parunastu lat, dopiero niedawno zyskała na popularności. Stało się tak dzięki opublikowanym pracom opisującym sukcesy w hodowaniu i badaniu właściwości ferromagnetycznych nanorurek.

4.2.1 Teoria Changa i Lee

Teoria nukleacji dla pola przyłożonego wzdłuż ferromagnetycznej rurki (bez anizotropii magnetokrystalicznej) została wywiedziona z teorii dla drutu przedstawionej w ust. 4.1.1. Pierwsza praca na ten temat zawierała tylko opis modu jednorodnego i wirowego [87]. Następna uwzględniała też mod falowy [88]. Analiza ta dała wyniki podobne do teorii nieskończonego drutu: profil modów jest taki sam (Rys. 4-2), a zależność pola nukleacji (równoważnego koercji, bo pętle histerezy są i tym razem prostokątne) od promienia ponownie wskazuje na dominującą rolę modu wirowego dla większych promieni rurki, a modu falowego dla mniejszych promieni rurki. Ponownie, koercja, H_n , jest normalizowana czynnikiem $\frac{1}{2}\mu_0 M_s$, a promień (zewnątrzny!) rurki, R , czynnikiem $\sqrt{2\pi}\lambda_{ex}$. W rezultacie oba te parametry są bezwymiarowe. Tym razem istnieje konieczność uwzględnienia jeszcze trzeciego parametru: ϕ jest stosunkiem promienia wewnętrznego, R_{int} , i zewnętrznego rurki, $\phi = R_{int}/R$. Zatem, $\phi = 0$ odpowiada litemu drutowi, a sytuacja $\phi \rightarrow 1$ opisuje rurkę o infinitezymalnie cienkiej ścianie. Przewidywania teorii Changa i Lee koercji dla różnych modów i pięciu wybranych wartości ϕ przedstawione są na * Rys. 4-7.

* Teoria Changa i Lee jest zgodna z teorią Frei i Aharoniego jeżeli przejdziemy z ϕ do zera. Przedstawione jednak wzory wymagają aby $\phi \neq 0$. Koercja dla przyjętej wartości $\phi = 0.001$ nie różni się zauważalnie w skali Rys. 4-7 od zależności dla drutu przedstawionych na Rys. 4-3.



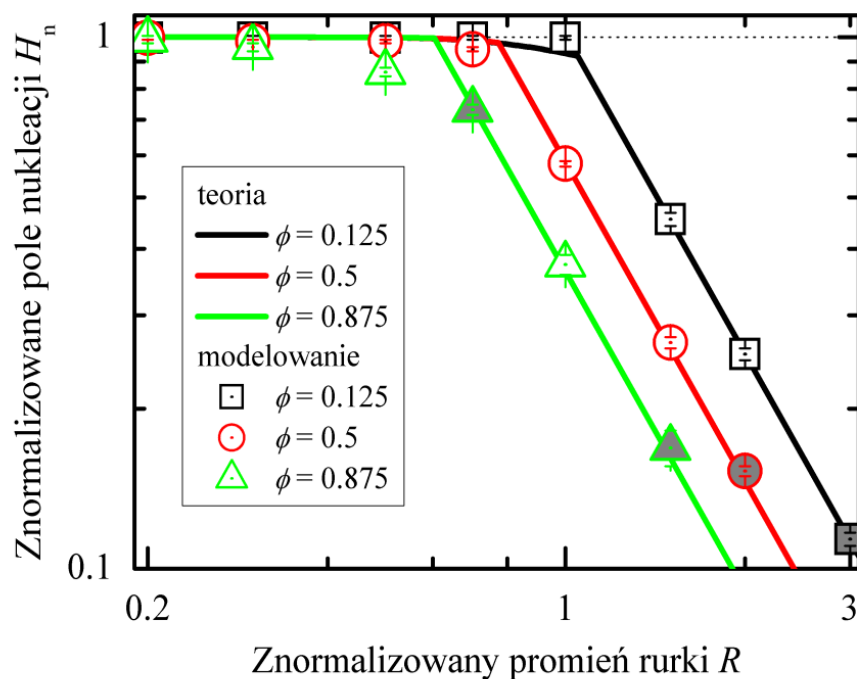
Rys. 4-7 Pole nukleacji (równoważne koercji), H_n , dla nieskończonej ferromagnetycznej rurki w funkcji jej zewnętrznego promienia, R . Obie wielkości, R i H_n , są bezwymiarowe. Ukazane są zależności dla różnych modów nukleacji i dla różnego parametru ϕ opisującego stosunek promienia wewnętrznego i zewnętrznego rurki, $\phi = R_{in}/R$. Dla modu jednorodnego $H_n(R) = 1$ niezależnie od przyjętego parametru ϕ . Wyniki teorii przedstawionej w pracach [87, 88].

Z przedstawionego rysunku wynika, że dla rurek cienkościennych koercję modu falowego można przybliżać koercją modu jednorodnego.

4.2.2 Modelowanie

Szczegóły modelowania mikromagnetycznego nieskończonych ferromagnetycznych rurek z użyciem periodycznych warunków brzegowych były takie same, jak w przypadku analizy drutów (ust. 4.1.2). Komórki były zawsze mniejsze niż $(3 \text{ nm})^3$. Główne różnice dotyczyły braku możliwości modelowania modu falowego. Wynikało

to z ograniczeń numerycznych: w tym wypadku konieczne było stosowanie małych komórek zarówno dla dużych, jak i dla małych promieni. Zapewne to było konieczne, by odpowiednio wiernie opisać ściankę rurki, co jest możliwe dopiero gdy ścianka ta ma grubość co najmniej dwóch komórek. Tak, jak i poprzednio ograniczenia numeryczne były związane z dużą ilością komórek i wynikającym stąd dużym obciążeniem procesora. Z teorii wynika, że dla $\phi \gtrsim 1/2$ koercja dla modu jednorodnego prawie się nie różni od wyniku dla modu falowego – do czego powrócę za chwilę. Ograniczenia numeryczne implikowały też trudności z potwierdzaniem wyników poprzez korzystanie z dwa razy gęstszej siatki dyskretyzacji. Nie wszystkie punkty, przedstawione na poniższych wykresach przeszły taki test. Dla wyróżnienia, przedstawiam je w inny sposób – ich wnętrze jest szare. Wyniki modelowania w szerokim zakresie promieni dla trzech wybranych wartości ϕ przedstawione są na Rys. 4-8.



Rys. 4-8 Koercja nieskończonej ferromagnetycznej rurki – porównanie teorii (mod wirowy i falowy) [87, 88] z modelowaniem wykorzystującym periodyczne warunki brzegowe wzdłuż rurki. Różne kolory przedstawiają teorię i modelowanie dla trzech wybranych wartości parametru ϕ opisującego grubość ścianki. Punkty wypełnione szarym kolorem odpowiadają analizie bez potwierdzenia podwójną siatką dyskretyzacji. Linia kropkowana: wyniki teorii dla modu jednorodnego. Rysunek z pracy [89].

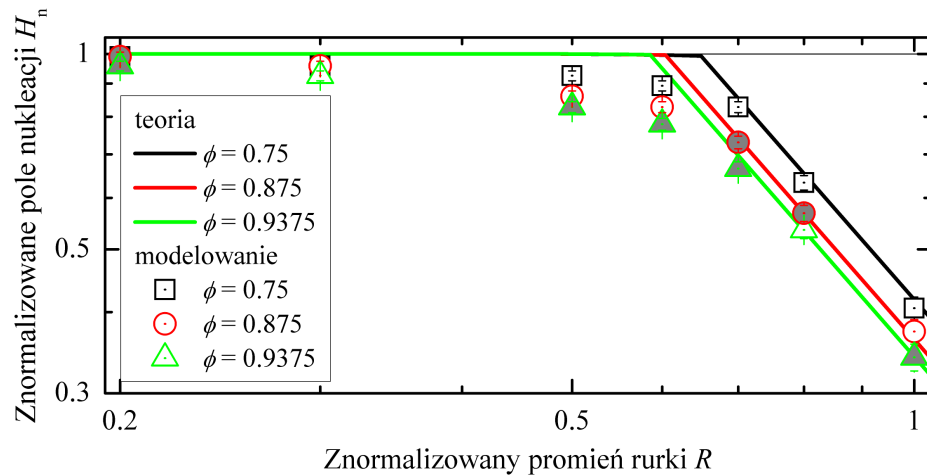
Na powyższym rysunku przedstawiłem wyniki teorii dla modu wirowego i falowego jedną grubą kreską. Wyniki modelowania są zasadniczo zgodne z przewidywaniami teorii, z dwoma wyjątkami omówionymi poniżej.

- $\phi = 0.125, R = 1$.

Należy podkreślić, że długość modelowania odpowiadała jednej komórce, co nie jest poprawne dla modelowania modu falowego. Taki sposób modelowania raczej odpowiada modowi jednorodnemu – rzeczywiście otrzymany wynik jest bliski przewidywania właśnie dla tego modu.

- $\phi = 0.5, R = 0.7; \phi = 0.875, R = 0.3..0.5$.

W przeciwieństwie do opisanego powyżej przypadku, wyniki modelowania w tym obszarze nie są zgodne z przewidywaniami teorii dla modu jednorodnego. Aby zbadać dokładniej to zjawisko przedstawiam na odrębnym rysunku wyniki modelowania dla rurek o cieńszych ściankach koncentrując się na obszarze małych promieni, patrz Rys. 4-9.



Rys. 4-9 Koercja nieskończonej ferromagnetycznej rurki – porównanie teorii z modelowaniem. Rysunek analogiczny do Rys. 4-8, tym razem modelowanie jest skoncentrowane na mniejszych promieniach i na rurkach o cieńszych ściankach. Rysunek z pracy [89].

Z rysunku tego, pomimo, że wiele zaprezentowanych punktów nie zostało potwierdzonych przez podwojenie gęstości siatki, widać wyraźną niezgodność modelowania z teorią w okolicy przejścia mod falowy/jednorodny $\Leftrightarrow$ mod wirowy. Niestety, jeden ze współautorów teorii, prof. Chang, nie jest w stanie wyjaśnić tych niezgodności [90]. Być może wyjaśnienia należałoby szukać w płynnym przejściu od modu falowego do modu wirowego, jak to opisał Frei [83]. Co prawda, możliwość taką wykluczył dla drutów Aharoni [84], ale może dla rurek jest to możliwe (zwłaszcza, gdy ich ścianki są cienkie)?

4.3 Nieskończona belka o przekroju prostokątnym

Ustęp niniejszy będzie się trochę różnić od dwóch poprzednich. Tak, jak i dotychczas, wyniki modelowania zostaną porównane z teorią. Tym razem jednak, po pierwsze porównanie będzie dotyczyć bezpośrednio tensora odmagnesowania, a po drugie w efekcie nie tylko będę wnioskować o zgodności modelowania z teorią, ale i o odchyleniu wartości modelowanych od teoretycznych. Dzięki temu, możliwe będzie sprawdzenie procedury kontroli błędów opisanej w rozdziale trzecim (ust. 3.5).

Przypadek belki o przekroju prostokątnym jest szczególnie ciekawy, gdy w modelowaniu korzysta się z prostopadłościennych komórek dyskretyzacji – tak, jak to jest w przypadku programu OOMMF. Dzięki prostopadłościennym komórkom można wiernie opisać kształt modelowanej prostopadłościennej próbki – unikając błędów związanych z chropowatością powierzchni powstałą w procesie dyskretyzacji przestrzeni (ust. 2.2).

4.3.1 Teoria

Z ust. 2.3 wiemy, że w ogólnym przypadku tensor odmagnesowania dla prostopadłościennej belki o przekroju prostokątnym jest funkcją położenia. Wartość tensora uśredniona po objętości próbki, $\langle N^{\text{theory}} \rangle = \langle N \rangle_V$ ma jednak wiele interesujących własności, np. można dzięki niej obliczyć energię jednorodnie namagnesowanego ciała (ust. 2.3). Wzory na $\langle N^{\text{theory}} \rangle$ są zaprezentowane np. w pracy Newella [63], a dla przypadku nieskończonej belki równoległej do osi z , wstawiłem w tych wzorach konkretne wartości wymiarów poprzecznych belki (tak naprawdę ważny jest tylko stosunek tych wymiarów) i przeszedłem do granicy z wymiarem wzdłuż osi z^* . Element diagonalny nieskończonej belki $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{zz}$ jest równy zero tak samo, jak w wypadku

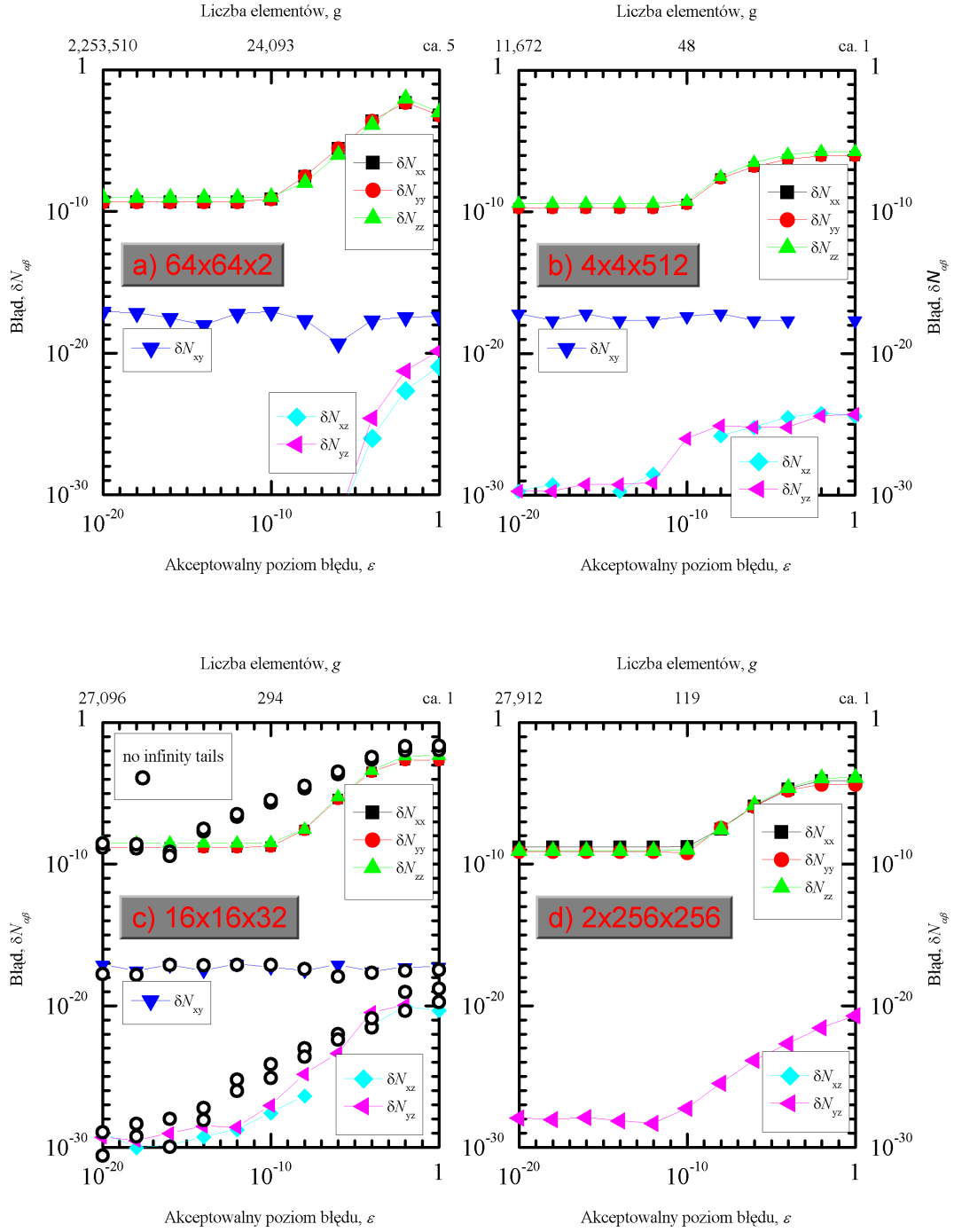
* Operację tę wykonałem z użyciem programu *Mathematica* dbając o wysoką precyzję wyników.

nieskończonego drutu. Elementy pozadiagonalne są równe zero na mocy symetrii, gdy ściany belki są prostopadłe do osi x i y . Ponieważ $\text{Tr}(\langle \mathbf{N}^{\text{theory}} \rangle) = 1$ [63], wynika z tego, że trzeba policzyć tylko, powiedzmy $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{xx}$.

4.3.2 Modelowanie

Zakładając stan namagnesowania belki jako jednorodny i równy $\mathbf{M} = (M_s, 0, 0)$, $\mathbf{M} = (0, M_s, 0)$, $\mathbf{M} = (0, 0, M_s)$ byłem w stanie dla każdego z tych przypadków wymodelować pole odnamagnesowania, $\mathbf{H}_d$. Uśredniony, modelowany tensor odnamagnesowania, $\langle \mathbf{N}^{\text{simul}} \rangle$, otrzymałem z zależności $\langle \mathbf{H}_d \rangle_V = -\langle \mathbf{N}^{\text{simul}} \rangle \mathbf{M}$, gdzie $\langle \mathbf{H}_d \rangle_V$ oznacza średnią pola $\mathbf{H}_d$ dla wszystkich komórek próbki.

Aby zbadać ewentualny wpływ kształtu modelowanej próbki (dokładniej: stosunku wymiarów jej boków) na otrzymane wyniki, rozważałem struktury o wymiarach (wyrażonych liczbą komórek $n_x \times n_y \times n_z$): $2 \times 2 \times 2048$, $4 \times 4 \times 512$, $16 \times 16 \times 32$, $64 \times 64 \times 2$, $64 \times 64 \times 1$, $2 \times 512 \times 8$, $2 \times 256 \times 256$, $1 \times 128 \times 64$, $2 \times 64 \times 64$, $2 \times 16 \times 256$, $8 \times 16 \times 64$. Elementy obliczonego tensora $\langle N^{\text{simul}} \rangle_{\alpha\beta}$ okazały się być bardzo bliskie odpowiadającym im wartościom teoretycznym $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{\alpha\beta}$. Na Rys. 4-10 przedstawione są różnice pomiędzy tymi wartościami, $\delta N_{\alpha\beta} = |\langle N^{\text{theory}} \rangle_{\alpha\beta} - \langle N^{\text{simul}} \rangle_{\alpha\beta}|$ w funkcji parametru „akceptowalnego błędu” (ust. 3.5) dla czterech wybranych struktur.



Rys. 4-10 Różnice między modelowanymi a teoretycznymi wartościami uśrednionych po objętości elementów tensora od magnesowania dla nieskończonej belki o przekroju prostokątnym. Dolna oś pozioma: akceptowalny poziom błędu, patrz ust. 3.5. Górna oś pozioma: numer obrazu, powyżej którego stosowana jest metoda N^{cont} (patrz ust. 3.4.2). Wyniki dla różnych rozmiarów modelowanego obszaru (podanych w komórkach). Na wykresie a) błędy δN_{xz} i δN_{yz} maleją monotonicznie do wartości ok. 10^{-40} dla $\varepsilon \approx 10^{-10}$. Wykres c) zawiera dodatkowo analizę obciążenia zasięgu oddziaływania dipolowego. Brak pewnych punktów oznacza błąd dokładnie równy zero.

Na rysunku pokazane są wyniki dla czterech struktur o różnych stosunkach wymiarów i o różnych liczbach komórek. Rys. 4-10 a) opisuje próbkę z małą długością modelowania – podobną, jaka była wykorzystywana w ust. 4.2 i 4.1 (z wyjątkiem modu falowego). Z kolei Rys. b) opisuje próbkę z dużą długością modelowania – takie struktury mogą być używane do badania zjawisk o dużym okresie periodyczności, jak np. analiza modu falowego w ust. 4.1. Rys. d) opisuje próbkę w kształcie taśmy – taka konfiguracja może być przydatna do badania okresowych struktur planarnych, jak np. przedstawiona dalej analiza oddziałujących trójkątów. Rys. c) przedstawia przypadek, gdzie zaobserwowałem największe błędy wraz z dodatkowymi punktami, które omówię później.

Tensor odmagnesowania jest symetryczny, w zgodzie z tym błędy pozadiagonalne $\delta N_{\alpha\beta}$ i $\delta N_{\beta\alpha}$ miały podobne wartości, więc dla przejrzystości na prezentowanych rysunkach pokazanych jest tylko sześć elementów tensora δN . Brak niektórych punktów na wykresach jest spowodowany ich zerową wartością (z wyjątkiem δN_{xz} i δN_{yz} na wykresie a). Dla niektórych struktur w całym zakresie badanego parametru ε pewne błędy były dokładnie równe zero, stąd na przykład brak punktów δN_{xy} na wykresie d). Na górnej osi wykresów jest przedstawiony numer obrazu, powyżej którego stosowana jest metoda N^{cont} , g, czyli mniej więcej połowa liczby dyskretnych elementów z Rys. 3-6 (patrz ust. 3.4.2).

Przedstawione na Rys. 4-10 wykresy, choć różnią się między sobą szczegółami, mają kilka cech wspólnych:

- Zgodnie z przewidywaniami (ust. 3.5), błędy maleją dla malejącego parametru ε . Błędy stabilizują się dla $\varepsilon \approx 10^{-12}..10^{-10}$. Choć w ust. 3.5 była mowa o możliwości nasycania się błędów w okolicy $\varepsilon \approx 10^{-15}$, to taką sytuację można wytłumaczyć obecnością innych błędów, np. związanych z metodami N^{cube} i N^{sphr} , albo z zaokrągleniami numerycznymi dla dużej liczby sumowanych składników.
- Zależność błędów od parametru ε jest jednakowa dla struktur o różnych kształtach. Nie można tego jednak powiedzieć o parametrze g . Dlatego opieranie algorytmów PBC o liczbę uwzględnianych obrazów (co jest analogią do parametru g) jest niewłaściwe. Dużo lepsze jest stosowanie wprowadzonego w ust. 3.5 parametru ε .
- Błędy δN_{xy} nie zależą od parametru ε .
- Błędy elementów diagonalnych są znacząco większe od błędów elementów pozadiagonalnych. Błędy δN_{zz} są bliskie błędom δN_{xx} i δN_{yy} , choć przecież elementy tensora $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{xx}$ i $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{yy}$ są niezerowe, a $\langle N^{\text{theory}} \rangle_{zz} = 0$.

Jak wspomniano w rozdziale drugim (ust. 2.4.3) popularne obecne implementacje periodycznych warunków brzegowych bazują na uwzględnieniu określonej, skończonej liczby obrazów i pominięciu pozostałych. Abstrahując od niewłaściwego wyboru kryterium obcięcia zasięgu oddziaływania dipolowego (parametr ε jest lepszym kryterium), sam fakt obcięcia tego zasięgu może budzić zaniepokojenie. W tym celu na Rys. 4-10 c) przedstawiłem rezultaty modelowania, gdzie zgodnie z parametrem g dokonałem obcięcia zasięgu oddziaływania (czarne punkty puste w środku), czyli punkty te nie uwzględniają składnika N^{cont} w sumie (3.11). Patrząc na największe zaobserwowane błędy, δN_{xx} , δN_{yy} i δN_{zz} , widzimy że dla małych wartości ε obcięcie zasięgu oddziaływania skutkuje dziesięciokrotnie większą wartością błędu. Dla dokładniejszych obliczeń (dla mniejszego ε), ten efekt jest nawet silniejszy prowadząc do tysięcy razy większych błędów w przypadku $\varepsilon \approx 10^{-10}$.

Podsumowując, analiza nieskończonej belki pozwoliła na wyciągnięcie ważnych wniosków. Po pierwsze, zgodnie z oczekiwaniami, parametr ε pozwala na kontrolę błędów elementów tensora od magnesowania. Po drugie, parametr g jest dużo gorszym

parametrem kontroli błędów. W dodatku ucięcie zasięgu oddziaływania dipolowego poprzez nieuwzględnianie obrazów o indeksie większym niż g prowadzi do znaczącego wzrostu błędów. Przypominam, że większość stosowanych obecnie implementacji PBC właśnie opiera się na parametrze g (często z góry zadany) i na takim obcięciu. Na koniec, ważną jest informacja, że największe dokładności można otrzymać dla $\varepsilon \approx 10^{-12}$, stosowanie mniejszych wartości tego parametru nie wpływa na dalszą poprawę wyników.

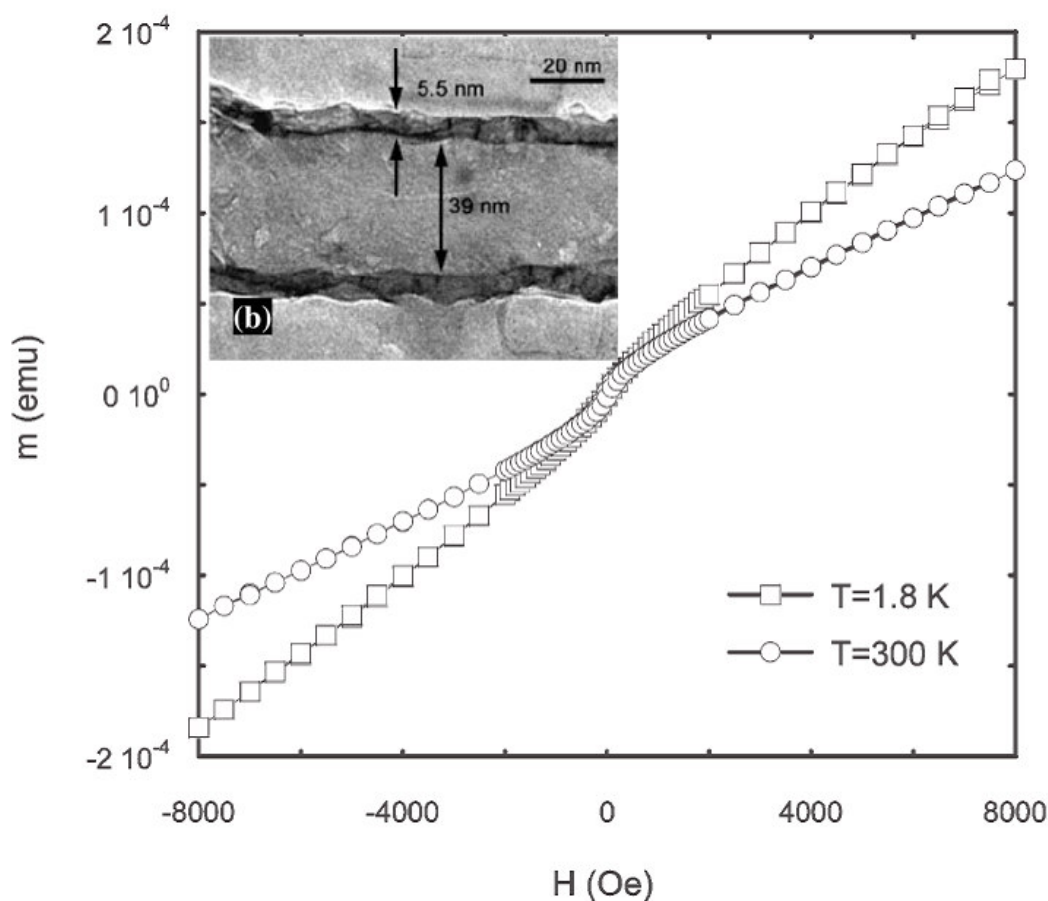
4.4 Pętla histerezy nanorurek kobaltowych

4.4.1 Dane doświadczalne

Ostatnio poczyniono znaczne postępy w hodowaniu nanostruktur przy użyciu matryc porowatych. Jest to w miarę tania technologia, dzięki której w jednym procesie można wytworzyć dużą liczbę kwazijednowymiarowych nanoobjektów. O ile właściwości magnetyczne *litych* nanodrutów są lepiej poznane (patrz np. praca przeglądowa Sellmyera [6]), o tyle badania *pustych* w środku ferromagnetycznych nanorurek, lub nanokabli (nanorurek wypełnionych innym materiałem) nie są jeszcze tak zaawansowane. Istnieje w literaturze co prawda kilka prac doświadczalnych odnośnie tego tematu [14-22], niewiele jest jednak prac próbujących wyjaśnić obserwowane efekty. Dla przykładu, chociaż obserwowana w doświadczeniu pętla histerezy nanorurek kobaltowych jest wyraźnie gładka, Nielsch stosuje teorię Changa i Lee dla nieskończonej ferromagnetycznej rurki [19], która wszak przewiduje prostokątną pętlę histerezy (ust. 4.2.1). Z kolei modelowanie przedstawione w pracy Lee jest ukierunkowane raczej na krótkie nanorurki, o stosunku długość:średnica 3:1 [36].

W rozdziale niniejszym zostaną przedstawione wyniki modelowania mikromagnetycznego dla doświadczenia Crowleya [17], gdzie zmierzono pętlę

histerezy dla nanorurek kobaltowych o średnicy 50 nm i długości dochodzącej do 90 μm . Badania rentgenowskie wskazują na warstwowe ułożenie płaszczyzn krystalicznych kobaltu Co-fcc równoległe do ścianek porów matrycy zrobionej z tlenku aluminium (AAO, ang. *anodized aluminium oxide*). Nanorurki mają intencjonalną grubość 3 nm, choć należy się liczyć z ich częściowym utlenieniem (ze względu na obecność powietrza i kontakt rurki z matrycą). Przedstawiona w pracy Crowleya histereza matrycy składającej się z $\sim 10^6$ nanorurek ukazana jest na Rys. 4-11.



Rys. 4-11 Pętla histerezy dla matrycy nanorurek kobaltowych. Nanorurki mają średnicę 50 nm, długość do 90 μm , intencjonalną grubość ścianki 3 nm. Pole jest przyłożone równoległe do nanorurek. Liczba nanorurek w matrycy to kilka milionów. Wstawka: zdjęcie z mikroskopu transmisyjnego przedstawiającego fragment podobnej nanorurki, o grubości ścianki około 5 nm. Rysunki z pracy Crowleya.

([17] – Reproduced by permission of The Royal Society of Chemistry.)

4.4.2 Modelowanie

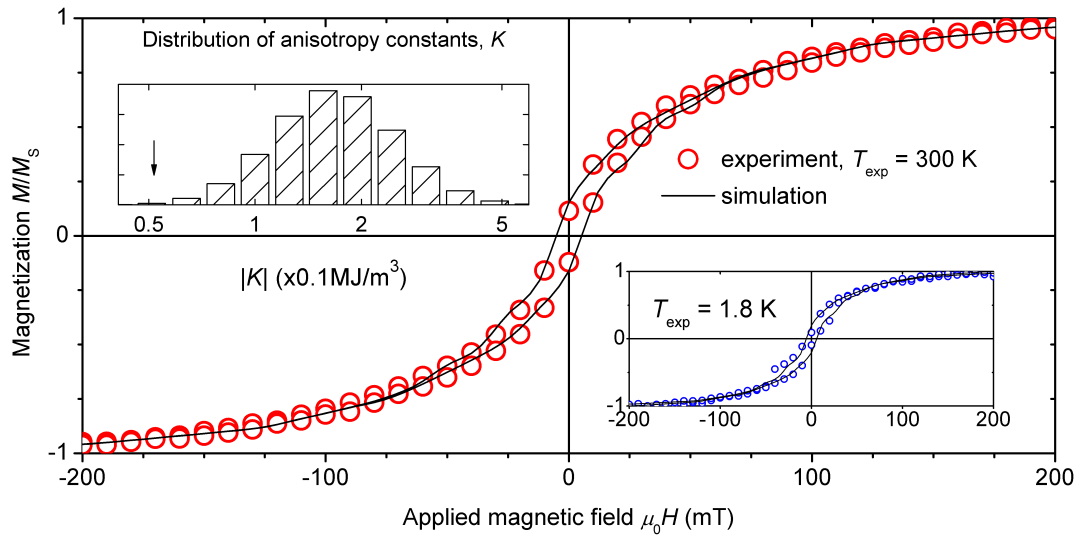
Znanym problemem przy badaniu matryc zawierających wiele jednakowych nanoelementów jest pytanie, czy modelując taki układ można analizować pojedynczy nanoelement, czy też trzeba uwzględniać długozasięgowe oddziaływanie pomiędzy wieloma takimi elementami. Dla nanodrutów to oddziaływanie powinno mieć większe znaczenie i są już prace modelujące oddziaływanie małej grupy nanodrutów [31]. Dla nanorurek Nielsch sugeruje pomijalne znaczenie oddziaływania pomiędzy poszczególnymi rurkami [19], gdyż w porównaniu z nanodrutami mają one stosunkowo mały moment magnetyczny. Kontynuując to założenie pętlę zmierzoną w doświadczeniu Crowleya modelowałem analizując pojedynczą, izolowaną nanorurkę.

Aby uwzględnić podłużny kształt nanorurki zastosowałem periodyczne warunki brzegowe wzdłuż jej osi. Takie założenie jest równoznaczne z zaniedbaniem istnienia końców rurki, które mogą grać istotną rolę w procesie nukleacji [36]. W realnym jednak przypadku, każda struktura ferromagnetyczna zawiera szereg defektów, które silnie wpływają na ruch domen – zarówno przez ich kotwiczenie (ang. *pinning*) jak i ich wywoływanie, nukleację. Dla długiej nanorurki możemy się zatem spodziewać nukleacji nie tylko na końcach, ale i w środku jej struktury. Taką sytuację przybliżam poprzez opis stosujący periodyczne warunki brzegowe. Dostępne komputery PC nie pozwalają jednak na modelowanie długich nanorurek – takich, jak w pracy Crowleya – przy uwzględnieniu istnienia defektów. Do tego celu trzeba by używać dużego okresu periodyczności (długości modelowania), większego od spodziewanego rozmiaru domen – co najmniej 1 μm . Rezultatem małego okresu PBC i braku uwzględnienia defektów będzie jednorodny rozkład namagnesowania w moim modelu (brak zależności od zmiennej z).

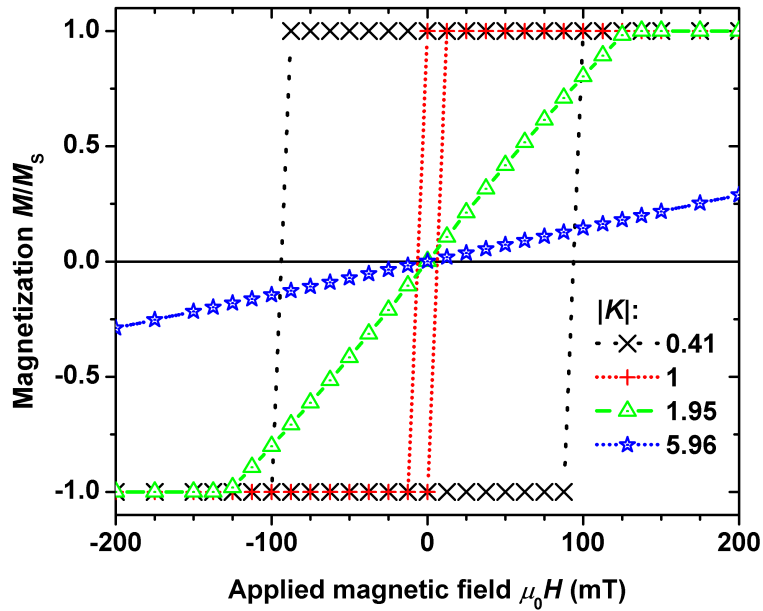
Obserwowany w doświadczeniu sygnał ma silny składnik paramagnetyczny (Rys. 4-11), po jego odjęciu widać jednak wyraźnie ferromagnetyczną reakcję próbki –

patrz Rys. 4-12 (punkty). Kształt pętli histerezy, m. in. mała koercja, nie może być wytłumaczony ani kształtem nanorurki ani anizotropią magnetokrystaliczną. Wręcz przeciwnie, wysokie wartości stosunku długość:średnica (sięgające 1000) powinny skutkować istnieniem zauważalnej anizotropii kształtu o łatwej osi równoległej do osi rurki. Z drugiej strony, kobalt o strukturze krystalicznej fcc ma stosunkowo małą wartość stałej anizotropii (-0.055 MJ/m^3 [91, 92]). Aby wyjaśnić wyniki doświadczalne można sugerować istnienie dodatkowej silnej* anizotropii, dla której oś rurki jest osią trudną. Dla odróżnienia, anizotropię tę będę określał jako „prostopadłą”. Taka dodatkowa anizotropia może być np. wywołana efektami megnetoelastycznymi – podobne postępowanie jest przedstawione w pracy Silva [93]. Innym możliwym źródłem anizotropii prostopadłej mógłby być efekt typu *exchange bias* mający swe źródło w oddziaływaniach na międzypowierzchni Co/CoO [94]. Wprowadzenie anizotropii prostopadłej umożliwia wytłumaczenie małej obserwowanej koercji, ale nie pozwala jeszcze wyjaśnić, dlaczego pętla histerezy jest gładka. Ten drugi fakt można interpretować jako przejaw różnorodności obserwowanych nanorurek. Mogą się one różnić pomiędzy sobą długością, średnicą, chropowatością, grubością warstwy tlenku kobaltu, efektywną grubością ścianki nanorurki, itd. Aby to uwzględnić założyłem, że mamy do czynienia z przedziałem różnych stałych anizotropii prostopadłej, K . Przykładowe pętla histerezy dla wybranych wartości K są przedstawione na Rys. 4-13. Z rysunku tego widać, że dla małych wartości $|K|$ pętla histerezy są prostokątne a koercja jest duża. Im większe wartości $|K|$, tym koercja jest mniejsza, aż wreszcie dla $|K| \gtrsim 1 \text{ MJ/m}^3$ pętla histerezy mają skośny charakter (z zerową koercją).

* Silnej, w porównaniu z anizotropią magnetokrystaliczną Co-fcc.



Rys. 4-12 Czerwone punkty: histereza matrycy nanorurek kobaltowych z pracy Crowleya [17] dla pomiarów w wysokiej temperaturze. Linia: wyniki modelowania zakładającego istnienie dodatkowej anizotropii o osi trudnej równoległej do osi nanorurki. Aby oddać gładki kształt pętli histerezy przyjąłem rozkład wartości stałych anizotropii, K , pokazany na lewej wstawce (strzałka pokazuje wartość anizotropii magnetokrystalicznej Co-fcc [91, 92]). Podobną procedurę zastosowałem opisując wyniki pomiarów w niskiej temperaturze – prawa wstawka. Szczegóły modelowania są opisane w tekście. Rysunek z pracy [95].



Rys. 4-13 Modelowanie pętli histerezy dla pojedynczej nanorurki i kilku wybranych wartości anizotropii „prostopadłej”, $|K| \times 0.1 \text{ MJ/m}^3$. Modelowanie dla takich samych parametrów, jak na Rys. 4-12. Rysunek z pracy [95].

Szczegóły modelowania wygodnie jest podać w punktach:

- Periodyczne warunki brzegowe w jednym wymiarze były narzucone wzdłuż nanorurki (wzdłuż osi z).
- Przyjęto stałe materiałowe: $A = 20$ pJ/m, $M_s = 1.4$ MA/m [91, 92, 96].
Średnica nanorurki: 51 nm, grubość jej ścianki: 3 nm, rozmiar komórki: $(1.5 \text{ nm})^3$.
Przeprowadziłem również analizę dla trochę innych stałych materiałowych, sprawdziłem też co się stanie rozważając rurkę o cieńszej ściance (warstwa kobaltu może być utleniona), stosując jednocześnie gęstszą siatkę dyskretyzacji. Zmiany te nie wpłynęły w znaczący sposób na wyniki końcowe przedstawione w tabelce poniżej [95].
- Anizotropia magnetokrystaliczna Co-fcc została zaniedbana.
- Długość modelowania: 1.5 nm. Testy przeprowadzone dla większych długości dały identyczne wyniki.
- Użyto pole dodatkowe (patrz ust. 6.1), zmienne losowo w przestrzeni, stałe w czasie o wielkości $|\mu_0 \mathbf{H}_{\text{offset}}| = 1$ mT.
- Pętle histerezy dla pojedynczej nanorurki (Rys. 4-13) były modelowane dla przyłożonego pola wzdłuż rurki w zakresie od -800 mT do $+800$ mT (czyli, tak jak w doświadczeniu Crowleya [17]).
- Podobnie, jak w opisanych dotychczas analizach mikromagnetycznych, rozwiązania numeryczne uzyskałem w procesie szukania minimum energii.
- Przyjąłem logarytmicznie normalny rozkład dyskretnych stałych anizotropii prostopadłej^{*}, $|K|$, który wyraża się wzorem (K_0 jest medianą, a σ bezwymiarowym parametrem szerokości rozkładu):

$$P(K) \propto \frac{1}{|K|\sigma} \exp\left(-\frac{\ln^2(|K|/|K_0|)}{2\sigma^2}\right). \quad (4.1)$$

^{*} Rozwazałem też inne rozkłady: normalny i równomierny (na odcinku). Każdy z nich prowadził do gorszego opisu danych doświadczalnych niż rozkład logarytmicznie normalny. Specyfika modelowania wymagała użycia dyskretnego, a nie ciągłego rozkładu.

- Rozkład (4.1) służył mi do wyznaczenia współczynników wagowych przez które mnożyłem pętle histerezy dla poszczególnych wartości K (Rys. 4-13). W rezultacie zsumowania takich ważonych wykresów otrzymałem pętlę histerezy dla grupy różnych nanorurek, patrz Rys. 4-12 (linia ciągła). Parametry rozkładu K_0 i σ wyznaczyłem w procesie dopasowania^{*}.

W rezultacie opisanej powyżej procedury, dla danych doświadczalnych zebranych w temperaturze pokojowej otrzymałem rozkład widoczny na lewej wstawce Rys. 4-12. Modelowana histereza grupy nanorurek (linia ciągła) w miarę dobrze opisuje dane doświadczalne (punkty). Wyniki analogicznej operacji przeprowadzonej dla danych otrzymanych w niskiej temperaturze są przedstawione na prawej wstawce Rys. 4-12. W rezultacie procedury dopasowania rozkładu otrzymałem następujące parametry:

	K_0 (kJ/m ³)	σ
$T_{\text{exp}} = 300$ K	-197	0.41
$T_{\text{exp}} = 1.8$ K	-179	0.39

Otrzymane wyniki są zgodne z przyjętym wcześniej założeniem o zaniedbywalnej roli anizotropii magnetokrystalicznej kobaltu w strukturze fcc, patrz strzałka na lewej wstawce Rys. 4-12. Zastanawiać może brak znaczącej zależności powyższych parametrów od temperatury. Bardziej szczegółowa analiza wymagałaby jednak więcej danych doświadczalnych. Na przykład pomiary grubości warstwy tlenku kobaltu są nieodzowne do szacowania wielkości efektów: magnetoelastycznego i *exchange bias*, natomiast pomiary rozkładu namagnesowania w nanorurkach mogłyby odpowiedzieć na pytanie jakie jest rzeczywiste ułożenie domen.

^{*} Z powodów technicznych, dane doświadczalne musiałem dopasowywać funkcją analityczną, którą z pewnością pętle histerezy pokazane na Rys. 4-13 nie są (ani ich ważona suma). Dlatego pętla histerezy dla grupy nanorurek (Rys. 4-12 linia ciągła) jest pozbawiona nieróżniczkowalnych skoków widocznych na Rys. 4-13.

4.5 Płaskie macierze trójkątów

Periodyczne warunki brzegowe w jednym wymiarze mogą służyć nie tylko do opisu struktur kwaziejednowymiarowych. Stworzone przeze mnie moduły mogą z powodzeniem być wykorzystane w modelowaniu próbek cechujących się periodycznością – takich, jak macierze złożone z litograficznie nałożonych trójkątów z permaloju, badane przez Vavassori (Rys. 4-14). Periodyczny charakter tych próbek, wraz z ich dużą rozciągłością przestrzenną (jedna próbka składa się z milionów jednakowych trójkątów) – są to dwa silne argumenty, by w tym wypadku korzystać z periodycznych warunków brzegowych. Oddziaływania pomiędzy sąsiednimi trójkątami nie sposób zaniedbać, gdy leżą one blisko siebie (jak w przypadku przedstawionym na Rys. b), nie można zatem skorzystać z otwartych warunków brzegowych. Z drugiej strony, rozmiary trójkątów są na tyle duże, że modelowanie pojedynczego trójkąta jest już wyzwaniem. Periodyczny charakter struktur, wraz z periodycznością obserwowanego namagnesowania (co potwierdzają obserwacje mikroskopowe) pozwala narzucać periodyczne warunki brzegowe o okresie zgodnym z periodycznością próbki.

Układy przedstawione na Rys. 4-14 nadają się idealnie do obserwacji przy użyciu dyfrakcyjnego magnetoptycznego efektu Kerra (D-MOKE) [97]. Badane jednakowe struktury (tu: trójkąty równoboczne) są rozmieszczone w regularnych odstępach na wystarczająco dużej powierzchni, rzędu 1 cm^2 , umożliwiającej swobodne zogniskowanie na niej światła. Obserwując intensywność kolejnych prążków dyfrakcyjnych można analizować tzw. współczynnik magnetyczny (ang. *magnetic form factor*), f_m , z którego można wnioskować o rozkładzie namagnesowania wewnątrz pojedynczej struktury (trójkąta). Technika taka oferuje bogatsze możliwości od standardowego pomiaru reakcji magnetycznej próbki, który można porównać z obserwacją zerowego prążka dyfrakcyjnego. Intensywność sygnału od zerowego prążka

jest bowiem proporcjonalna do średniego namagnesowania wewnątrz trójkąta:

$$f_m(0) \propto \iint_{\text{triangle}} M(r) dS, \text{ gdzie całkowanie odbywa się po powierzchni trójkąta. Z kolei}$$

sygnał od prążków wyższego, n -tego, rzędu, jest proporcjonalny do

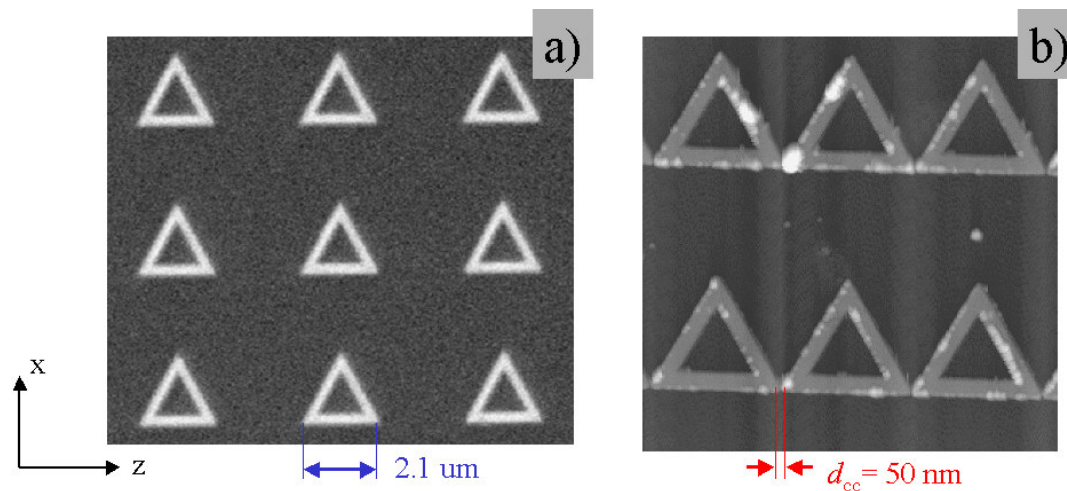
$$f_m(n) \propto \iint_{\text{triangle}} M(r) \exp(inGr) dS, \text{ gdzie } G \text{ jest wektorem sieci odwrotnej dla}$$

macierzy trójkątów [97, 98].

W celu usprawnienia procesu modelowania napisałem dodatkowy moduł do programu OOMMF liczący wartości współczynników magnetycznych dla prążków o rzędach od zero do dziewięć* $f_m(0) \dots f_m(9)$. W tym celu korzystałem z pracy przeglądowej opisującej technikę D-MOKE [98]. Napisany przeze mnie moduł oblicza oddzielnie część rzeczywistą i urojoną współczynnika magnetycznego[†]. W doświadczeniu mierzona jest intensywność będąca liniową kombinacją tych wartości.

* Prążki dyfrakcyjne D-MOKE są tym trudniejsze w obserwacji, im wyższy jest ich rząd. W publikacjach można znaleźć wyniki dla prążków rzędu 5 lub mniej.

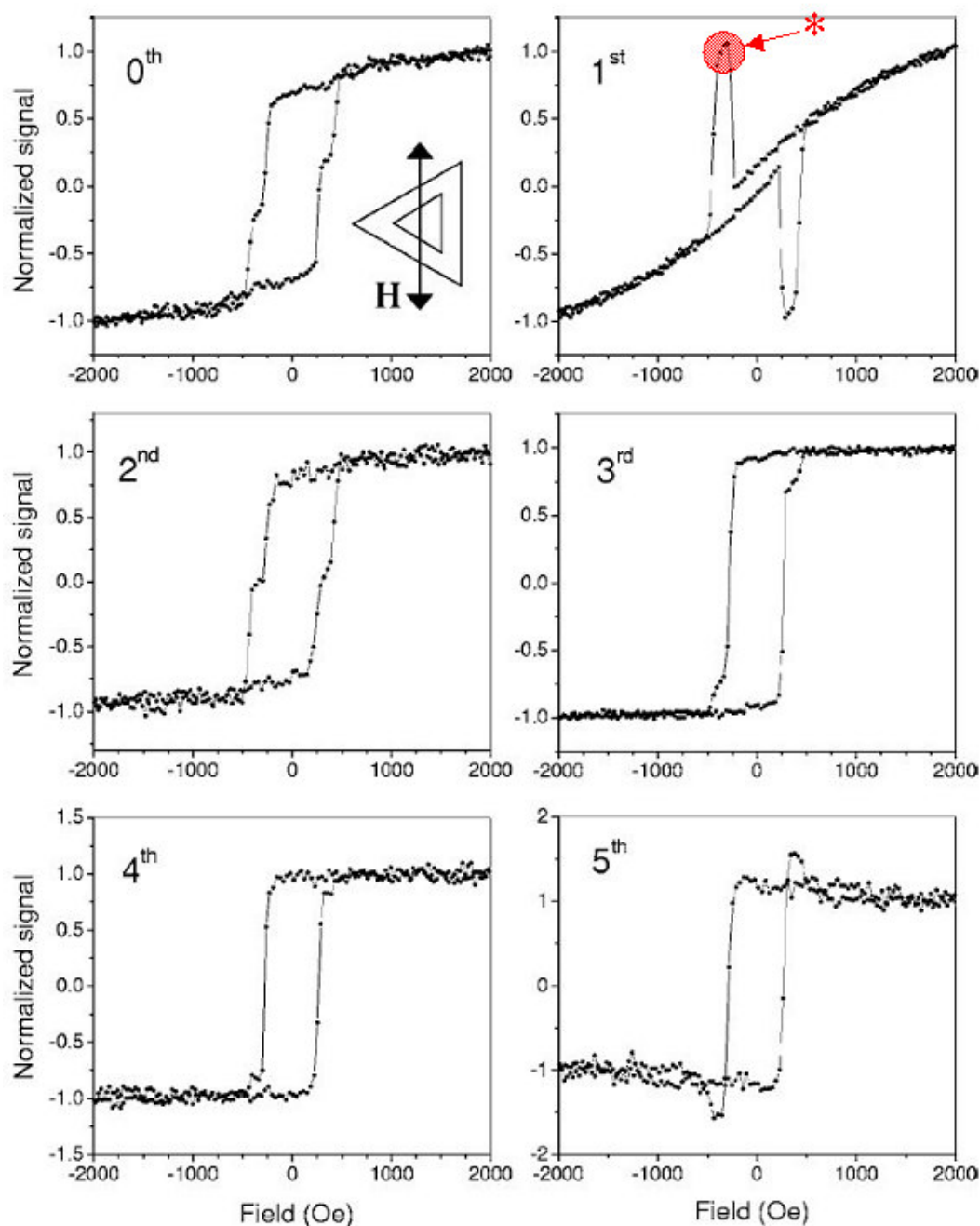
[†] $f_m(0)$ jest wielkością czysto rzeczywistą.



Rys. 4-14 Zdjęcia mikroskopu elektronowego (a) i mikroskopu sił atomowych (b) przedstawiające równoboczne trójkąty z permalaju naniesione litograficznie. Trójkąty ułożone są w periodyczne struktury o całkowitych rozmiarach rzędu 1 cm^2 . Każdy z trójkątów ma bok o długości około $2\text{ }\mu\text{m}$. Takie próbki są badane przy zastosowaniu magneto-optycznego dyfrakcyjnego efektu Kerra (D-MOKE) [97]. Zdjęcie a) przedstawia oddalone, „izolowane” trójkąty, podczas gdy w przypadku b) odległość pomiędzy wierzchołkami sąsiednich trójkątów umieszczonych w poziomych rzędach, d_{cc} , wynosi 50 nm .

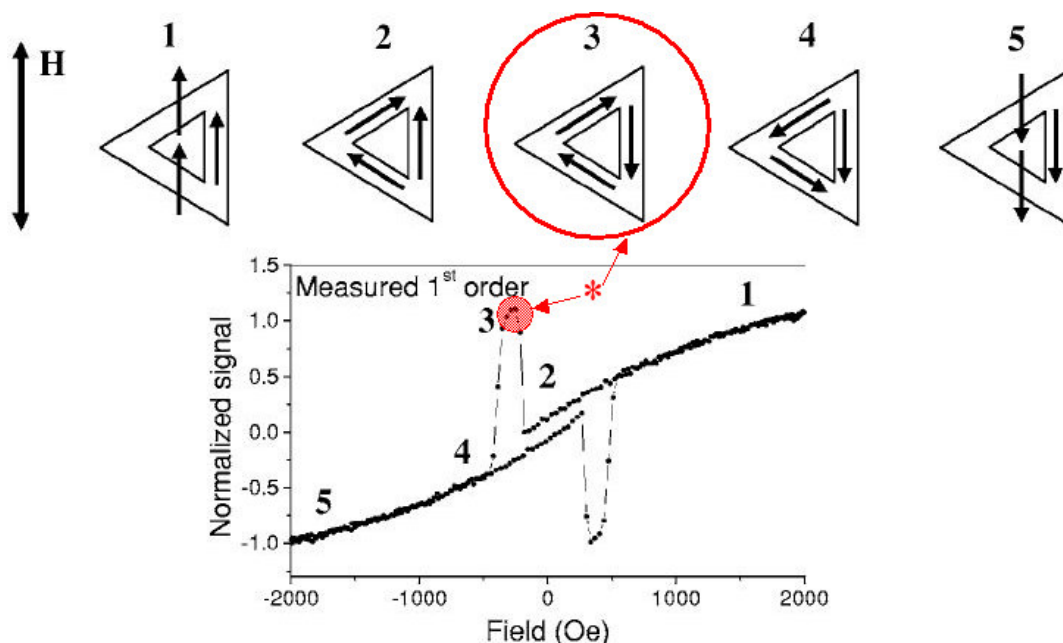
4.5.1 Eksperyment, macierze izolowanych trójkątów

W rozważanym doświadczeniu, dla macierzy „izolowanych” trójkątów, czyli gdy odległość pomiędzy wierzchołkami sąsiednich trójkątów, d_{cc} , jest porównywalna z długością boku trójkąta (Rys. 4-14 a), pole magnetyczne przyłożone jest równoległe do osi z. Na Rys. 4-15 przedstawione są wyniki pomiaru D-MOKE dla kolejnych prążków dyfrakcyjnych.



Rys. 4-15 Sygnały D-MOKE dla pola przyłożonego równoległe do boku trójkąta wykonanego z permalaju. Pomiar dla matrycy podobnej do Rys. 4-14 a). Długość boku trójkąta: 2 μm , szerokość jego ramienia: 250 nm, grubość warstwy permalaju: 25 nm. Odstępy pomiędzy środkami trójkątów: 4.2 μm i 4.6 μm , odpowiednio wzdłuż osi x i z (Rys. 4-14). Załamanie słabo widoczne w sygnale zerowego prądu (taki wykres można porównać z pętlą namagnesowania) jest wyraźnie widoczne jako pik na wykresie dla pierwszego prądu. Na tym, i na następnych rysunkach, pik ten jest oznaczony gwiazdką.
(Reprinted with permission from [97]. Copyright 2005, American Institute of Physics.)

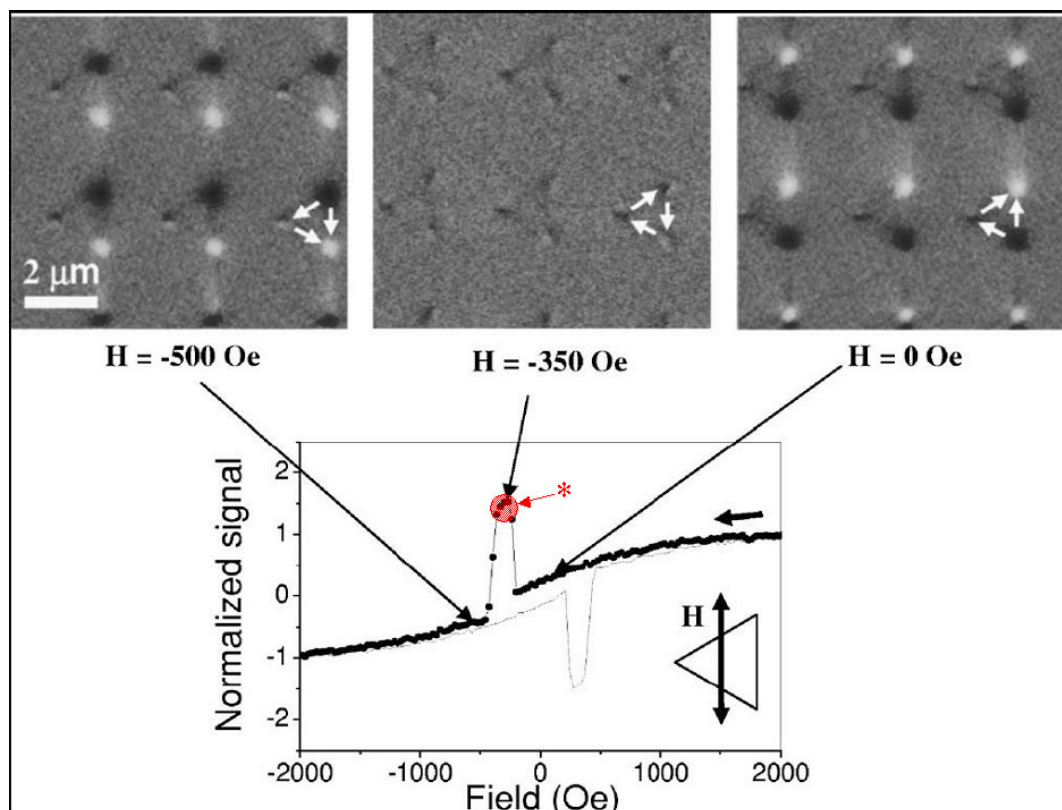
Oznaczony gwiazdką na Rys. 4-15 pik dla sygnału pochodzącego od pierwszego prążka związany jest z silną zmianą układu namagnesowania wewnątrz trójkąta, patrz Rys. 4-16, zmianą pomiędzy schematycznymi rozkładami 2, 3 i 4.



Rys. 4-16 Kształt pętli z Rys. 4-15 dla pierwszego prążka wraz ze schematycznym pokazaniem układu namagnesowania w ramionach trójkąta.

(Reprinted with permission from [97]. Copyright 2005, American Institute of Physics.)

Silne przyłożone pole skutkuje rozkładem namagnesowania w trójkącie prawie równoległym do kierunku pola (Rys. 4-16, schematy 1 i 5). Dla słabszych pól, poszczególne ramiona trójkąta są namagnesowane w przybliżeniu jednorodnie. W okolicy pików występuje układ o „zamkniętym” charakterze, gdzie linie sił pola brzegowego (generowanego przez namagnesowany trójkąt) niewiele wychodzą poza trójkąt (schemat 3). Przedstawiona powyżej koncepcja jest potwierdzona zdjęciami z mikroskopu MFM, patrz Rys. 4-17. Jest ona też potwierdzona modelowaniem mikromagnetycznym zaprezentowanym w pracy [97] (gdzie rozmiar komórki jest być może trochę za duży) i przeze mnie – patrz ust. 4.5.3.



Rys. 4-17 Zdjęcia MFM towarzyszące pikowi przedstawionemu wcześniej na Rys. 4-16. Jasne i ciemne obszary na zdjęciach wskazują na obecność składowej pola brzegowego rejestrowanego przez mikroskop MFM, prostopadłego do powierzchni kartki.

(Reprinted with permission from [97]. Copyright 2005, American Institute of Physics.)

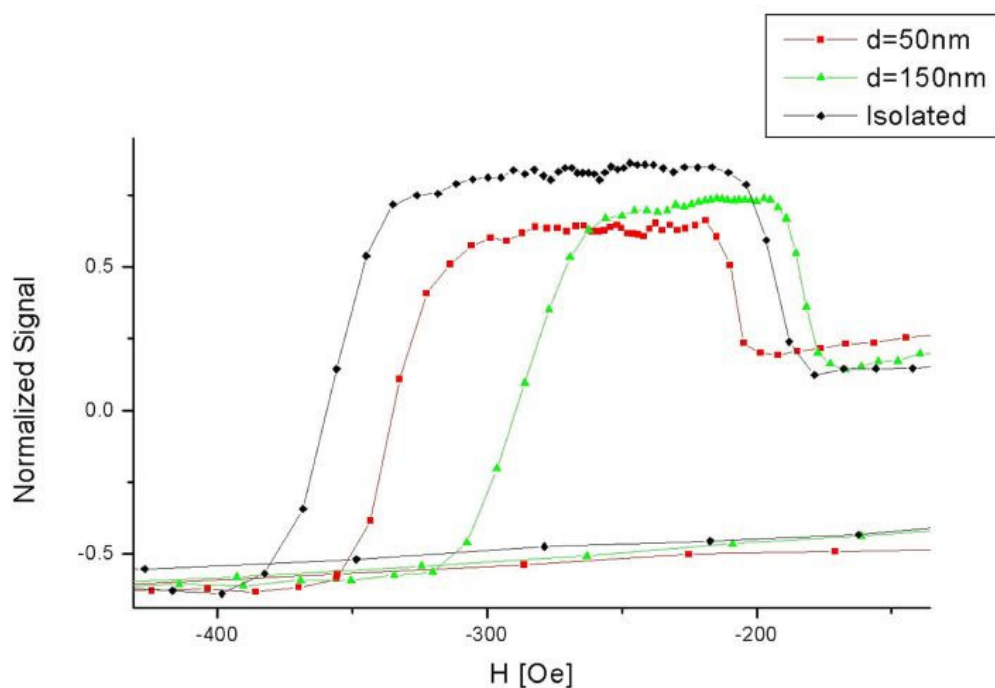
Zdjęcia MFM potwierdzają schemat układu namagnesowania wewnątrz każdego trójkąta przedstawiony wcześniej na Rys. 4-16: w obszarze piku trójkąt jest namagnesowany w ten sposób, że pole brzegowe jest małe. W obszarze poza pikiem dwa wierzchołki trójkąta są zawsze źródłem zauważalnego pola brzegowego widocznego na zdjęciach MFM jako ciemne lub jasne obszary.

4.5.2 Eksperyment, macierze blisko leżących trójkątów

Pomiary takie, jak przedstawione na Rys. 4-15—Rys. 4-17 zostały przeprowadzone dla serii próbek, ze zmienną odległością wzdłuż osi z pomiędzy sąsiednimi wierzchołkami trójkątów, d_{cc} , (Rys. 4-14 b): 50 nm, 100 nm, 150 nm i 2.35 μm . Za każdym razem

odległość wzdłuż osi x pomiędzy sąsiednimi „poziomymi” łańcuchami trójkątów była stała i równa^{*} 4 μm . Długość boku trójkąta wynosiła 2.1 μm , szerokość jego ramienia 250 nm, grubość warstwy permaloju: 35 nm. Niestety próbki dla $d_{\text{cc}} = 100$ nm i $d_{\text{cc}} = 150$ nm odbiegały od tych standardów, gdyż ramiona trójkątów były szersze (odpowiednio 350 nm i 300 nm). Chcąc zatem porównywać ze sobą identyczne próbki, różniące się tylko dystansem d_{cc} , dysponujemy tylko dwoma przypadkami: $d_{\text{cc}} = 50$ nm i $d_{\text{cc}} = 2.35$ μm . Ten drugi przypadek, z racji dużej wartości dystansu, jest określany jako trójkąty izolowane. Praca ta została wykonana przez grupę prof. Vavassori, który wcześniej pracował na uniwersytecie w Ferrarze (Włochy), a obecnie jest w centrum nanoGUNE w Donostia (Hiszpania). Na Rys. 4-18 widoczny jest fragment histerezy sygnału od pierwszego prążka, w okolicy piksu oznaczonego gwiazdką na Rys. 4-16 i Rys. 4-17. Rys. 4-18 przedstawia wyniki dla $d_{\text{cc}} = 50$ nm i dla izolowanych trójkątów. Dodatkowo, pokazane są też wyniki dla $d_{\text{cc}} = 150$ nm, choć jak już pisałem wystąpiły problemy z faktycznymi rozmiarami trójkątów w tym wypadku.

^{*} Jest to dokładnie mówiąc okres periodyczności wzdłuż osi x.



Rys. 4-18 Powiększenie pętli sygnału dla pierwszego prążka, takiej jak na Rys. 4-16. Powiększony obszar dotyczy okolic pików oznaczanych na dotychczasowych rysunkach gwiazdką. Oznaczenie „d” na rysunku odpowiada symbolowi d_{cc} używanemu przeze mnie w tekście i opisuje odległość wierzchołków sąsiednich trójkątów (Rys. 4-14 b).

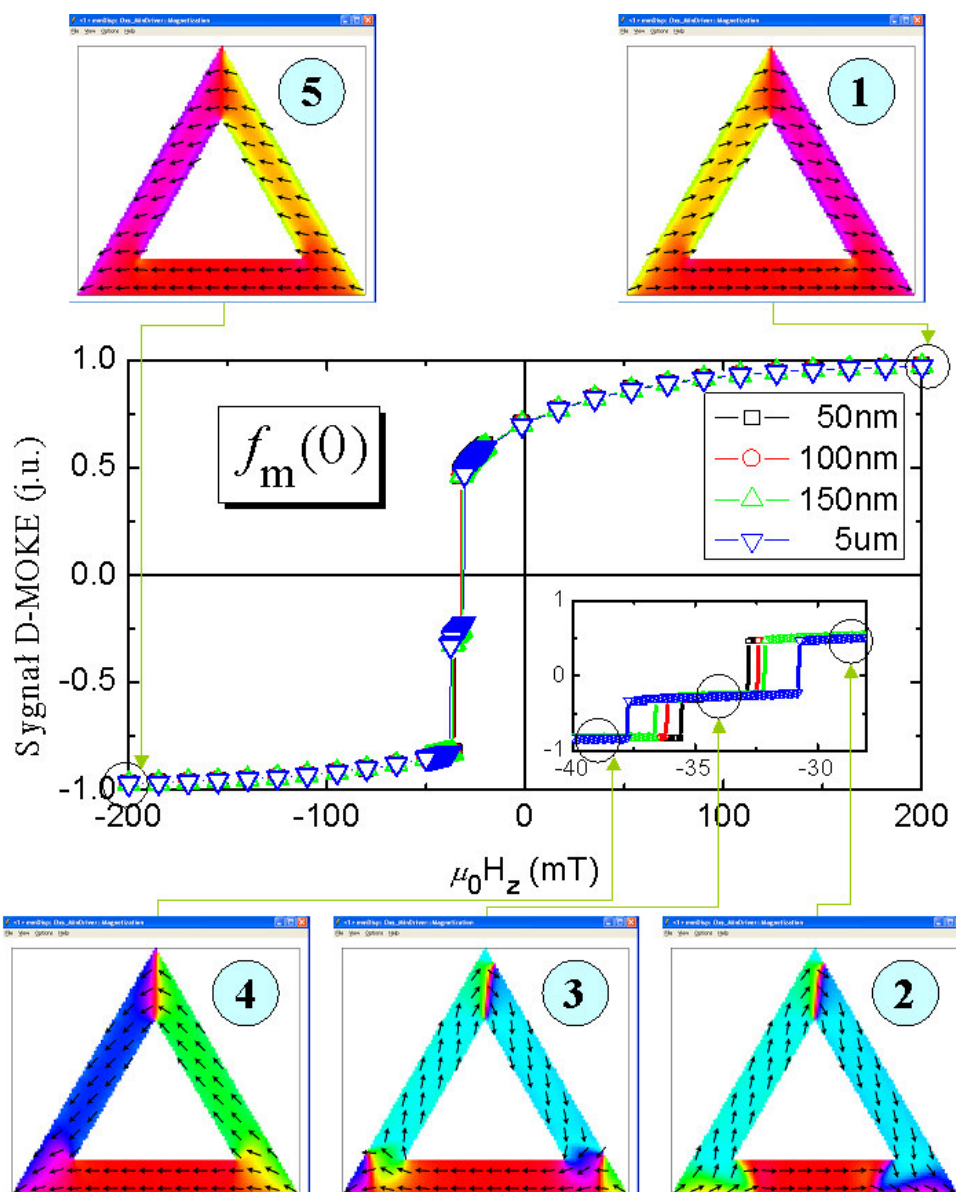
Autorem zaprezentowanego rysunku jest grupa prof. Vavassori.

4.5.3 Modelowanie, macierze blisko leżących trójkątów

Wyniki doświadczalne widoczne na Rys. 4-18 wydają się wskazywać na malejącą szerokość pików dla malejącej odległości d_{cc} . W celu potwierdzenia tej tezy, przeprowadziłem szereg analiz mikromagnetycznych. Modelowałem pojedynczy trójkąt korzystając z periodycznych warunków brzegowych w jednym wymiarze (wzdłuż osi z, Rys. 4-14). Obecna w doświadczeniu periodyczność wzdłuż osi x pominąłem – przyjąłem że sąsiednie trójkąty są na tyle odległe wzdłuż tej osi, że mogą być traktowane jak izolowane. Przyjąłem następujące stałe materiałowe dla permaloju ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$): $M_s = 796 \text{ kA/m}$, $A = 13 \text{ pJ/m}$ i brak anizotropii magnetokrystalicznej [99]. Wynikająca z nich długość wymiany, $\lambda_{ex} \approx 5.72 \text{ nm}$, pozwala na stosowanie komórek o maksymalnym rozmiarze około $(5 \text{ nm})^3$. Niestety, dostępne komputery PC nie

pozwalają na modelowanie trójkątów o rozmiarach takich, jak w doświadczeniu. Przedstawiam tu zatem wyniki dla modelowania równobocznych trójkątów o odpowiednio przeskalowanych, mniejszych rozmiarach: długość boku trójkąta wynosiła 1.28 μm , szerokość jego ramienia 150 nm, grubość warstwy permaloju 20 nm, rozmiar komórki (5 nm)³. Ze względu na moc dostępnych komputerów musiałem się ograniczyć do połówki pętli histerezy sygnału współczynnika magnetycznego $f_m(n)$. Z racji przyjętego skalowania, nie jest możliwe ilościowe porównywanie wyniku modelowania z danymi doświadczalnymi. Odległość pomiędzy trójkątami, d_{cc} , została dobrana jako* 50 nm, 100 nm, 150 nm i 5 μm . W rezultacie modelowania otrzymałem pętlę histerezy $f_m(0)$ zaprezentowaną wraz z rozkładem namagnesowania w kilku wybranych punktach pętli na Rys. 4-19.

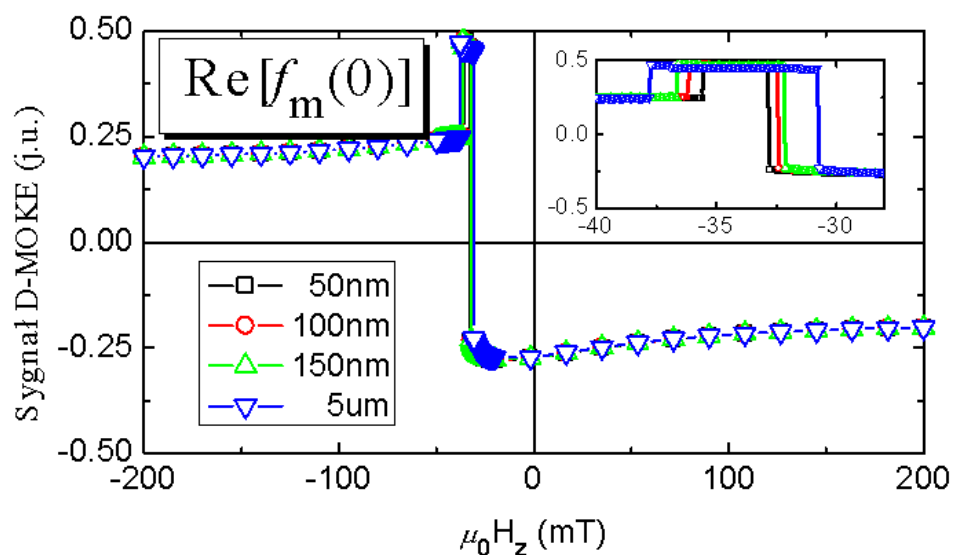
* Nie byłem pewny, jakie powinienem używać skalowanie dla dystansu d_{cc} (np. takie samo, jak dla wymiarów trójkąta?), a skoro porównanie modelowania z eksperymentem jest i tak tylko jakościowe, to nie użyłem żadnego skalowania. Wartość dystansu d_{cc} dla izolowanych trójkątów jest ewidentnie za duża, ale przy takich odległościach to nie powinno wpływać znacząco na wyniki modelowania.



Rys. 4-19 Środek rysunku: jedna gałąź pętli histerezy dla pola zewnętrznego przyłożonego równoległe do dolnego ramienia trójkątów. Wykres intensywności zerowego prążka sygnału D-MOKE (co jest równoważne średniemu namagnesowaniu) w funkcji przyłożonego pola. Cztery zaprezentowane wykresy różnią się odległością pomiędzy wierzchołkami sąsiednich trójkątów, $d_{cc} = 50 \text{ nm} \dots 5 \mu\text{m}$. Na początku pętli, dla $H_z \approx 200 \text{ mT}$, namagnesowanie trójkąta jest z grubsza rzecz biorąc równoległe do przyłożonego pola (rozkład nr 1, górna prawa część rysunku; strzałki przedstawiają kierunek namagnesowania). Śledząc rozkłady 2..5, widać zgodność z zaprezentowanymi na Rys. 4-16 schematami.

Komplementarną informacją do powyższego wykresu jest wykres części rzeczywistej współczynnika magnetycznego dla drugiego prążka, $\text{Re}(f_m(2))$. Zgodnie z

zapowiedzią, okolice zmiany układu namagnesowania 2-3-4 z Rys. 4-19 są widoczne jako wyraźny pik na Rys. 4-20.



Rys. 4-20 Analogiczny wykres do Rys. 4-19, tym razem część rzeczywista współczynnika magnetycznego dla drugiego prążka w funkcji przyłożonego pola.

Przedstawione wyniki pozwalają potwierdzić doświadczalnie stwierdzony fakt monotonicznej zależności szerokości piku z Rys. 4-20 od odległości d_{cc} . Przedstawiona poniżej tabela przedstawia szerokość tego piku w połowie jego wysokości (FWHM, ang. *full width (at) half maximum*) dla różnych wartości dystansu d_{cc} , obliczona na podstawie danych doświadczalnych i modelowanych. Dla danych doświadczalnych podane są dwie wartości powstałe z analizy dwóch gałęzi pętli histerezy.

d_{cc}	Eksperyment	Modelowanie
	FWHM (mT)	FWHM* (mT)
50 nm	7.5, 8.1	2.74
100 nm	-	3.73
150 nm	(9.4, 10.0) [†]	4.47
izolowane	11.4, 10.6	7.10

* Dokładność: 0.07 mT.

[†] Porównywanie jest tu utrudnione, bo dla $d_{cc} = 150$ nm trójkąty miały trochę inny kształt, patrz ust. 4.5.2.

5 Podsumowanie i wnioski

W niniejszej pracy przedstawiłem mikromagnetyczne modelowanie struktur kwaziejednowymiarowych przy użyciu okresowych warunków brzegowych.

Zwykle w badaniach mikromagnetycznych okresowe warunki brzegowe są narzucane poprzez obcięcie zasięgu oddziaływań dipolowych. Aby tego uniknąć i w pełni zachować długi zasięgowy charakter tych oddziaływań została opracowana oryginalna metoda. Opracowany algorytm umożliwia kontrolowanie błędów powstałych na każdym etapie modelowania. Z jednej strony wprowadzenie kontroli ujawniło błędy numeryczne obecne przy stosowaniu dokładnych wzorów dla oddziaływania dipolowego pomiędzy sześciennymi komórkami. Aby uniknąć eskalacji tych błędów, komórki bardziej oddalone od siebie są traktowane jak dipole punktowe, przy czym znany jest błąd związany z takim przybliżeniem. Dla najbardziej oddalonych komórek, zastosowane jest przybliżenie ciągłego rozkładu momentu magnetycznego, przy czym znowu znany jest błąd takiego podejścia.

Kontrola obecna na każdym etapie obliczeń pozwala na automatyzację procesu minimalizowania błędów wyników końcowych. W rezultacie, dzięki wprowadzeniu jednego parametru opisującego błąd, całość modelowania może być łatwo zaplanowana. Możliwe są obliczenia zgrubne, gdy czas modelowania jest czynnikiem krytycznym, jak i dokładne, ograniczone tylko przez dostępny sprzęt.

Przeprowadzone testy opracowanego algorytmu wskazują na jego skuteczność i przydatność. Otrzymano dużą zgodność pomiędzy modelowaniem, a teorią nukleacji w nieskończonym drucie – dużo większą niż we wcześniejszej pracy Ferre [86]. Podobna teoria dla ferromagnetycznej rurki została też w miarę dobrze oddana w procesie

modelowania. Wyjaśnienie różnic pomiędzy tą teorią a modelowaniem dla cienkościennych rurek wymagałoby dokładniejszej analizy zjawisk zachodzących w takich strukturach. Z kolei modelowanie nieskończonej prostopadłościenną belki pozwoliło sprawdzić zaproponowany mechanizm kontroli błędów. Niewątpliwie najciekawszym wnioskiem wynikającym z porównania tego modelowania z przewidywaniami teoretycznymi jest uniwersalny charakter wykresów przedstawionych na Rys. 4-10. Mianowicie, niezależnie od wymiarów badanych struktur błędy kontrolowane parametrem ε charakteryzują się podobną zależnością. Przeprowadzony test obciążenia zasięgu oddziaływania dipolowego dla struktury pokazanej na Rys. 4-10 c) pozwolił ilościowo ocenić błędy, które powstają w wyniku takiego przybliżenia (obecnego często w programach modelujących).

Modelowanie z wykorzystaniem zaproponowanej implementacji PBC pozwoliło wyjaśnić wyniki doświadczalne przedstawione w dwóch ostatnich ustępach rozdziału czwartego. Histereza zespołu nanorurek kobaltowych zaobserwowana przez Crowleya [17] została potwierdzona przy założeniu istnienia dodatkowej anizotropii, której natura nie jest dokładnie znana, a której stała może się trochę zmieniać od rurki do rurki. Z kolej współpraca z grupą prof. Vavassori pozwoliła potwierdzić w procesie modelowania zjawiska obserwowane w blisko leżących trójkątach z permaloju.

Zaproponowany algorytm jest dostępny dla szerokiego grona użytkowników popularnego oprogramowania OOMMF [28]. Warto zwrócić uwagę, że stosowanie periodycznych warunków brzegowych w zaproponowanej formie jest łatwe, wystarczy je po prostu „włączyć”. Bardziej wymagający użytkownicy mogą narzucić warunek większego lub mniejszego akceptowalnego poziomu błędu (ust. 6.2). Nie bez znaczenia jest też dodatkowy czas obliczeń potrzebny do modelowania z użyciem periodycznych warunków brzegowych. Doświadczenie autora wskazuje, że nawet przy najniższym

poziomie akceptowalnego błędu, czas potrzebny na liczenie tensora N^{PBC} był krótki w porównaniu z resztą zaprezentowanych w rozdziale czwartym rachunków. Zapisanie do pliku raz obliczonego tensora – tak, by przy następnych rachunkach nie liczyć go ponownie, stwarza wręcz potencjalną możliwość szybszych obliczeń, niż w przypadku stosowania otwartych warunków brzegowych*.

Prostota i uniwersalność przedstawionej propozycji pozwala zastosować ją do innych programów modelujących, w tym też dla okresowych warunków brzegowych w dwóch wymiarach lub dla programów bazujących na nieregularnej siatce podziału. Ponieważ badania kwazijednowymiarowych struktur ferromagnetycznych są coraz bardziej popularne, można mieć nadzieję na aplikacyjne zastosowania niniejszej pracy.

* Zapis tensora od magnesowania do pliku i jego późniejszy odczyt nie jest zaimplementowany w podstawowej wersji programu OOMMF, takiej jaką można pobrać ze strony NIST. Dopiero zainstalowanie napisanych przeze mnie modułów umożliwia korzystanie z tej funkcjonalności (ust. 6.2.2).

6 Dodatki

6.1 Pole dodatkowe

W rachunkach numerycznych nie operuje się liczbami rzeczywistymi, lecz ich przybliżonymi wartościami. W efekcie, w procesie modelowania mogą się pojawić numeryczne niestabilności spowodowane np. uproszczoną geometrią stosowanego modelu: idealnie prostopadłościenny kształt próbki i zewnętrzne pole przyłożone dokładnie równoległe do którejś krawędzi próbki. Objawem takich niestabilności może być, np. wielokrotnie zawyżona koercja. Wyjściem z tej sytuacji jest wprowadzenie dodatkowych mikrozaburzeń. Można to osiągnąć na przykład przez lekką zmianę kierunku przyłożonego pola, z reguły pole to odchyła się o kąt rzędu jednego stopnia^{*} – patrz opis standardowych problemów muMag #1 i #2 [100]. Tak powstały, dodatkowy składnik pola określa się jako pole dodatkowe (ang. *offset field*). W moich analizach stosowanie tego typu pola dodatkowego okazało się jednak niewystarczające. Najwyraźniej struktury nieskończone charakteryzują się wysoką symetrią i konieczne okazało się stosowanie dodatkowego pola o losowym charakterze. Uwzględnienie tylko lekkiego odchylenia kierunku przyłożonego pola dawało bowiem niestabilne wyniki, co opiszę na konkretnym przykładzie.

W celu przeprowadzenia analizy problemu pola dodatkowego modelowałem nieskończony drut o właściwościach materiałowych takich samych jak w ust. 4.1: $M_s = 0.49 \text{ MA/m}$, $A = 9.604 \text{ pJ/m}$ (rozmiar komórki[†]: $(5 \text{ nm})^3$). Drut taki, o promieniu 40 nm

^{*} Takie małe odchylenie kierunku pola może być zresztą nieintencjonalnie obecne w eksperymencie.

[†] Ten rozmiar komórki jest trochę za duży by poprawnie opisywać przewidywaną przez teorię koercję 83 mT. Celem tej analizy nie było jednak dokładne testowanie teorii nieskończonego drutu, lecz wpływu pola dodatkowego.

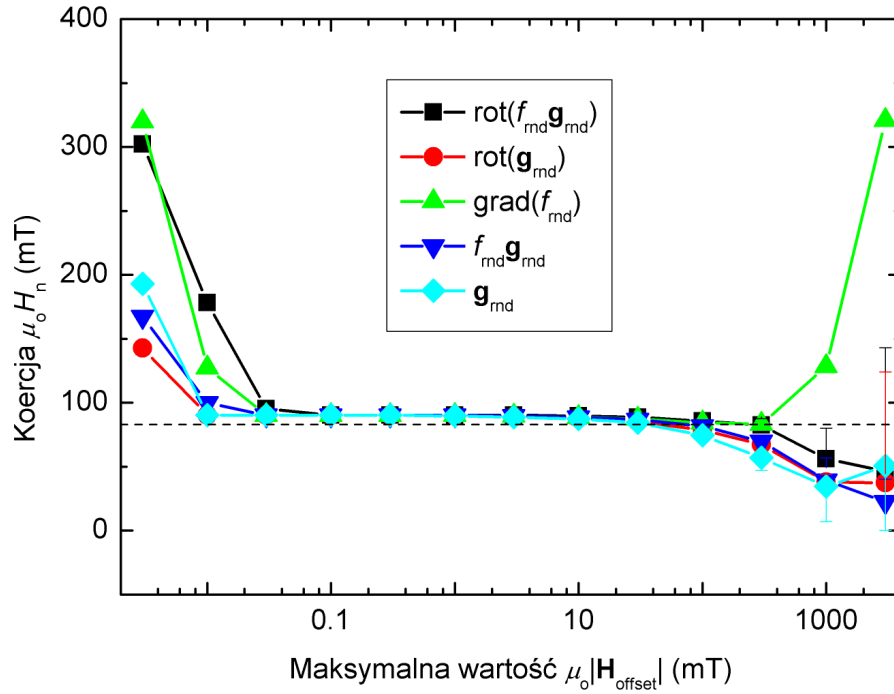
i przy braku anizotropii magnetokrystalicznej charakteryzuje się anizotropią kształtu w kierunku osi drutu, równoległej do osi z, patrz ust. 4.1. Przykładając zewnętrzne pole w kierunku osi z powinniśmy otrzymywać kwadratowe pętle histerezy, a teoria przewiduje w takim wypadku koercję równą $H_n(\text{theory}) \approx 83 \text{ mT}$. Pole zewnętrzne było odchylone o około 1 stopień od osi z. W takiej sytuacji modelowana koercja, H_n , była po pierwsze dużo wyższa od wartości $H_n(\text{theory})$, ale dodatkowo silnie zależała od takich czynników, jak początkowe namagnesowanie próbki (patrz przypis na str. 87), czy wybór metody „minimalizowanie energii” / „równanie dynamiczne” (ust. 2.2). Oznacza to, że wyniki są niestabilne. W celu usunięcia tej niestabilności, oprócz wspomnianego wyżej pola dodatkowego polegającego na lekkim odchyleniu przyłożonego pola, uwzględniłem stałe w czasie, losowo zmienne w przestrzeni (od komórki do komórki) pole dodatkowe, zgodnie z jednym z równań:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}_{\text{offset}} &= \alpha \mathbf{g}_{\text{rnd}}, \\
 \mathbf{H}_{\text{offset}} &= \alpha f_{\text{rnd}} \mathbf{g}_{\text{rnd}}, \\
 \mathbf{H}_{\text{offset}} &= \alpha \text{grad}(f_{\text{rnd}}), \\
 \mathbf{H}_{\text{offset}} &= \alpha \text{rot}(\mathbf{g}_{\text{rnd}}), \\
 \mathbf{H}_{\text{offset}} &= \alpha \text{rot}(f_{\text{rnd}} \mathbf{g}_{\text{rnd}}),
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

gdzie:

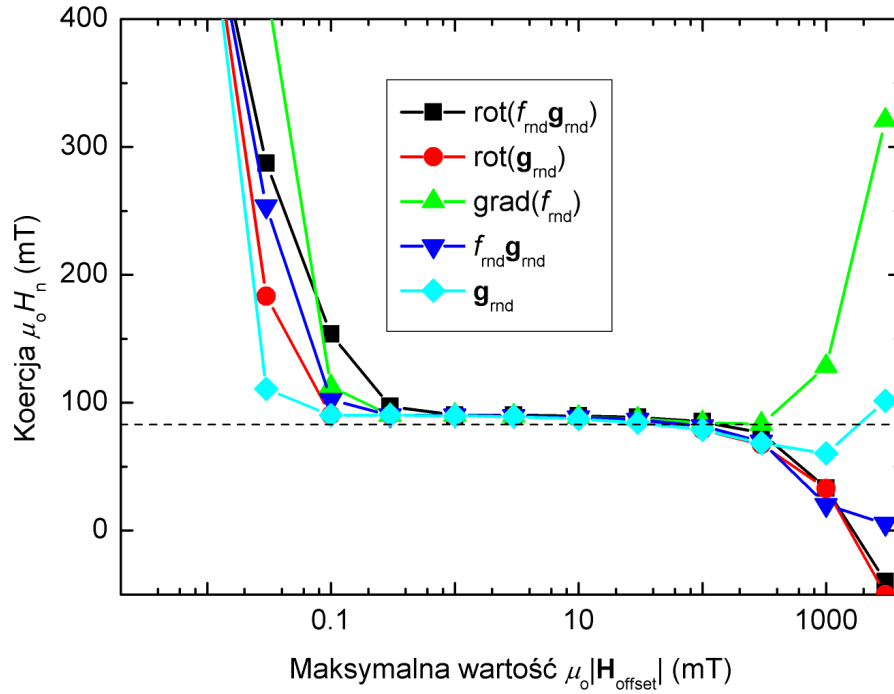
- α jest skalarnym czynnikiem regulującym wielkość („siłę”) pola dodatkowego, o wymiarze A/m,
- $\mathbf{g}_{\text{rnd}}(i,j,k)$ jest wektorową funkcją, której argumentem jest indeks komórki (i,j,k) ; funkcja $\mathbf{g}_{\text{rnd}}$ ma losowy kierunek i jednostkową wartość, $|\mathbf{g}_{\text{rnd}}| = 1$,
- $f_{\text{rnd}}(i,j,k)$ jest skalarną funkcją, której argumentem jest indeks komórki (i,j,k) ; funkcja f_{rnd} ma losową wartość z przedziału $[0,1]$.

Koercja dla modelowanej pętli histerezy jest przedstawiona na Rys. 6-1 oddzielnie dla każdego rodzaju uwzględnionego pola dodatkowego (6.1).



Rys. 6-1 Koercja nieskończonego ferromagnetycznego drutu (oś pionowa) o promieniu 40 nm i stałych materiałowych takich, jak w ust. 4.1. Rezultat modelowania zgodnego z ust. 4.1.2. Teoretyczna wartość koercji, 83 mT, jest zaznaczona poziomą przerywaną kreską (patrz ust. 4.1.1). Wyniki modelowania przy uwzględnieniu różnych pól dodatkowych (ang. *offset field*) o różnej sile (oś pozioma). Modelowanie metodą minimalizowania energii (ust. 2.2).

Na wykresie tym widać, że modelowana koercja silnie zależy od wielkości losowego pola dodatkowego. Parametr α za każdym razem był ustawiany tak, by maksymalne wartości pola $|\mathbf{H}_{\text{offset}}|$ odpowiadały poszczególnym wartościom osi poziomej z Rys. 6-1. Dla małych wartości α widoczna jest niestabilność wyników. Z kolei, dla dużych wartości α pole $\mathbf{H}_{\text{offset}}$ jest na tyle duże, że zaczyna wpływać na modelowaną koercję. Dla średnich wielkości α obserwujemy plateau, jest to obszar gdzie pole dodatkowe nieznacznie wpływa na rezultaty modelowania, pozwala jednak na uniknięcie niestabilności. Podobny wykres można wykonać dla metody „równania dynamicznego” (zamiast szukania minimum energii, ust. 2.2), patrz Rys. 6-2.



Rys. 6-2 Wykres analogiczny do Rys. 6-1, tym razem modelowanie z wykorzystaniem metody „równania dynamicznego” (ust. 2.2).

Podsumowując, stosując pole dodatkowe zgodne z jednym ze wzorów (6.1) i przyjmując takie α , że maksymalne wartości pola są równe mniej więcej 1 mT, można uniknąć pojawiania się niestabilności. Ponieważ wszystkie typy rozważanego pola dodatkowego (6.1) przynoszą ten sam efekt (Rys. 6-1 i Rys. 6-2), prezentowane w rozdziale czwartym wyniki są uzyskane korzystając z $\mathbf{H}_{\text{offset}} = \alpha \mathbf{g}_{\text{md}}$, gdzie $\mu_0 \alpha = 1$ mT. Wybraną wielkość pola dodatkowego można określić jako małą poprzez porównanie jej z wartością namagnesowania nasycenia, $\mu_0 M_s$, która dla popularnych metali ferromagnetycznych jest rzędu jednej tesli. Dalej, wprowadzenie losowego pola $\mathbf{H}_{\text{offset}}$ można porównać z modelowaniem efektów temperaturowych w mikromagnetyzmie, gdzie stosowane jest losowe, zmienne w czasie i przestrzeni, pole Langevina [101, 102]. W zagadnieniach numerycznych średnia wartość tego pola jest równa [56]

$$H_{\text{th}}(T) = \sqrt{\frac{2\alpha k_B T}{\Delta t (1 + \alpha^2) \bar{\gamma} \mu_0 M_s V_{\text{el}}}}, \quad (6.2)$$

gdzie α i $\bar{\gamma}$ to odpowiednio współczynnik tłumienia i współczynnik giromagnetyczny – omówione w ust. 2.1.6, k_B to stała Boltzmanna, T to temperatura, Δt to skok czasu przy numerycznym rozwiązywaniu równania Landaua-Lifshitz-Gilberta (2.13), μ_0 to przenikalność próżni, M_s to namagnesowanie nasycenia, a V_{el} to objętość komórki dyskretyzacji. Przyjmując, że współczynnik α ma wartości z przedziału 0.01—0.1, czas Δt jest najczęściej z zakresu 0.01 ps—1 ps, $\bar{\gamma} \approx 2 \times 10^5 \text{ m/As}$, $\mu_0 M_s \approx 1 \text{ T}$, a komórka ma objętość około $(1 \text{ nm})^3$ [56] otrzymujemy następujące wartości

$$\begin{aligned} \mu_0 H_{\text{th}}(1\text{K}) &\approx 0.046\text{T}..1.5\text{T}, \\ \mu_0 H_{\text{th}}(100\text{K}) &\approx 0.46\text{T}..15\text{T}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Widać zatem, że dla przyjętych wartości parametrów $H_{\text{th}} \gg |\mathbf{H}_{\text{offset}}|$.

6.2 Opis obsługi modułu OOMMF-PBC

Pliki konfiguracyjne dla programu OOMMF są napisane w języku zbliżonym do języka Tcl (patrz np. [103]). Zanim przedstawię zasady korzystania z napisanego przeze mnie modułu umożliwiającego korzystanie z periodycznych warunków brzegowych (PBC), chciałbym pokazać ogólne zasady obowiązujące przy pisaniu plików konfiguracyjnych dla programu OOMMF. Przykładowy fragment prostego pliku konfiguracyjnego jest przedstawiony poniżej.

```

...
# Wymiary próbki: 10nm x 20nm x 40nm
Specify Oxs_BoxAtlas:atlas {
    xrange { 0 10e-9 }
    yrange { 0 20e-9 }
    zrange { 0 40e-9 }
}
# Oddziaływanie wymienne. Stała wymiany: 13 pJ/m
Specify Oxs_UniformExchange {
    A      13e-12
}
# Oddziaływanie dipolowe
Specify Oxs_Demag {
}
...

```

Przedstawiona powyżej definicja zawiera:

- komentarze poprzedzone znakiem #,
- określenie kształtu (tu: prostopadłościan) i rozmiarów próbki^{*},
- stwierdzenie, że trzeba uwzględnić oddziaływania wymienne o podanej wartości stałej wymiany A (próbka jest jednorodna),
- stwierdzenie, że trzeba uwzględnić oddziaływania dipolowe.

Aby uwzględnić PBC w jednym wymiarze (wzdłuż osi z) i skorzystać z napisanego przeze mnie modułu należy zamiast standardowo dostępnych w OOMMF obiektów `Oxs_UniformExchange` i `Oxs_Demag` skorzystać odpowiednio z obiektów[†]: `Klm_UniformExchange` i `Klm_Demag_PBC`. Te nowe obiekty – tak naprawdę są to klasy C++ – zostaną poniżej szczegółowo opisane.

6.2.1 Klasa `Klm_UniformExchange`

Klasa ta ma taki sam parametr obowiązkowy „ A ”, jak jej odpowiednik `Oxs_UniformExchange`. Oprócz tego jest jednak dostępny parametr opcjonalny:

^{*} Wielkości fizyczne w OOMMF są podawane w jednostkach SI.

[†] Zanim skorzystamy z modułu OOMMF-PBC, trzeba go najpierw poprawnie zainstalować. Nie będę tego kroku szczegółowo tu opisywać, jest on opisany w instrukcji do modułu. Głównym problemem w instalacji jest z reguły skompilowanie całego standardowego programu OOMMF, co z kolei jest szczegółowo opisane w instrukcji obsługi OOMMF.

- `kernel`

Możliwe wartości ("`6ngbr`" domyślne):

- "`6ngbr`"

Taka wartość odpowiada „standardowemu” zachowaniu OOMMF, a więc brakowi PBC.

- "`6ngbrzperiod`"

Taka wartość odpowiada 1D PBC wzdłuż osi z.

- Parametr `kernel` może mieć też inne wartości, nieudokumentowane w instrukcji OOMMF. Nie będę ich tutaj omawiać, gdyż są one rzadko stosowane, poza tym dotyczą sytuacji braku okresowych warunków brzegowych.

6.2.2 Klasa `Klm_Demag_PBC`

Aby uwzględnić w modelowaniu oddziaływania dipolowe, w przypadku braku PBC korzystamy z klasy `Oxs_Demag`, która nie ma żadnych parametrów. Jeżeli chcemy narzucić 1D PBC i skorzystać z klasy `Klm_Demag_PBC` mamy do dyspozycji szereg parametrów. Dla ułatwienia, wszystkie one mają wartości domyślne, są to więc parametry nieobowiązkowe. Należy jednak pamiętać, by ustawić wartości najważniejszych z tych parametrów. Oto lista parametrów:

- `z_period`

Możliwe wartości zmiennopozycyjne (domyślnie: 0.0) określają długość modelowania w metrach. Zerowa wartość oznacza długość równą długości obszaru modelowania wzdłuż osi z, np. `zrange` z przykładu pokazanego w ust. 6.2.

Wielkości większe niż rozmiar obszaru modelowania odpowiadają przypadkowi nie stykających się „wysp” oddzielonych obszarem próżni. Umożliwia to modelowanie okresowych macierzy, takich jak w ust. 4.5.

Wielkości mniejsze są dopuszczalne, ale wyświetlany jest ostrzegawczy komunikat.

- `progress_script`

Wartości tekstowe (domyślnie: `""`) opisują położenie skryptu `kl_progress.tcl` umożliwiającego śledzenie postępu pracy modułu OOMMF-PBC (autorem skryptu `kl_progress.tcl` jest Michael Donahue z NIST). Należy tu stosować konwencje opisu plików zgodną z instrukcją OOMMF [28]. Ponieważ liczenie tensora N^{PBC} może być czasochłonne, wskazane jest korzystanie z tego parametru. Wartość `""` oznacza brak informacji o postępie obliczeń. Uwaga! Zamknięcie okna postępu prowadzi do przerwania obliczeń!

- `tensor_file_name`

Możliwe wartości tekstowe (domyślnie: `""`) opisują nazwę ścieżki lub pliku, gdzie zostaną umieszczone obliczone wartości tensora N^{PBC} . Przy następnym uruchomieniu modułu zapisane wartości zostaną w miarę możliwości* ponownie użyte. Należy tu stosować konwencje opisu plików zgodną z instrukcją OOMMF [28]. Ponieważ liczenie tensora N^{PBC} może być czasochłonne, wskazane jest korzystanie z tego parametru. Wartość `""` oznacza nie korzystanie z tej funkcjonalności. Z powodów technicznych, każdorazowo są tworzone dwa pliki o nazwie kończącej się na „1” i „2”.

Możliwe są dwie sytuacje:

- Pliki są zapisywane zawsze pod tą samą nazwą.

W takiej sytuacji parametr `tensor_file_name` musi zawierać nazwę pliku, do której zostaną dodane jeszcze odpowiednie końcówki. Na przykład, jeżeli `tensor_file_name= "/tmp/dt_"`, to pod kontrolą systemu Windows zostaną utworzone dwa pliki: `C:\tmp\dt_1.ovf` i `C:\tmp\dt_2.ovf`.

* Aby przy ponownym uruchomieniu programu móc skorzystać z zapisanych w pliku wartości N^{PBC} , nie można w międzyczasie zmienić parametrów wpływających na te wartości, jak np. `fidelity_level`. Zmiana takich parametrów skutkuje ponownym obliczeniem N^{PBC} i odświeżeniem informacji w pliku.

- o Pliki są zapisywane zawsze na tej samej ścieżce, ich nazwa zależy od rozmiaru siatki.

W takiej sytuacji parametr `tensor_file_name` musi zawierać nazwę ścieżki, czyli musi się kończyć znakiem `"/`. Na tej ścieżce będą umieszczane pliki o nazwach skonstruowanych zgodnie z regułą:

`t-<x-cells>-<y-cells>-<z-cells>-<z-period>-
[1|2]<tensor_file_suffix>`, gdzie `<x-cells>` oznacza liczbę komórek wzdłuż osi x (analogicznie dla osi y i z), a wartość `<z-period>` jest wyrażona ilością komórek. Przykładowo, dla konfiguracji przedstawionej w ust. 6.2.3 pod kontrolą systemu Windows zostaną utworzone dwa pliki\*: `C:\demag_tensors\t-10-20-40-40-1.ovf` i `C:\demag_tensors\t-10-20-40-40-2.ovf`.

- `fidelity_level`
Możliwe wartości zmiennopozycyjne (domyślnie: 10^{-10}) określają parametr kontroli błędów ε wprowadzony w ust. 3.5.
- `max_no_sum_elements`
Możliwe wartości całkowite (domyślnie: 10^5) definiują liczbę sumowanych elementów (indeks g z Rys. 3-6) w przypadku, gdy $N_{a\beta} = 0$, czyli w przypadkach, gdy nie można stosować kryterium opartego na `fidelity_level`, patrz ust. 3.5.
- `no_of_sum_elements`
Możliwe wartości całkowite (domyślnie: 0) definiują liczbę sumowanych elementów. Jest to alternatywna metoda ustalania promienia R_2 . Preferowaną metodą jest jednak operowanie `fidelity_level`. Jeżeli `no_of_sum_elements = 0`, wtedy stosowanym kryterium jest `fidelity_level`.
- `tensor_file_suffix`
Możliwe wartości tekstowe (domyślnie: `".ovf"`) opisują przyrostek dodawany na końcu nazw plików zawierających wartości N^{PBC} .

* Zakładając rozmiar komórki równy $(1 \text{ nm})^3$ i parametr `tensor_file_name` równy `"/demag_tensors/"`.

- `error_A_img_diag, error_A_dip_diag,`
`error_A_img_OFFdiag, error_A_dip_OFFdiag`

Możliwe wartości są liczbami zmiennopozycyjnymi odpowiadającymi

odpowiednio parametrom $B_{xx}^{cube}, B_{xx}^{sphr}, B_{xy}^{cube}, B_{xy}^{sphr}$ ze wzoru (3.10). Ich wartość

domyślna jest taka, jak w tym wzorze.

Wartości parametrów p ze wzoru (3.10) są ustawione w programie na stałe. Jest to uargumentowane analizą wykonaną poprzez rozwijanie na szereg Taylora przez Donahue [82].

- `include_inf_tails`

Możliwe wartości są liczbami 0 lub 1 (domyślnie: 1) decydującymi czy

uwzględniać (wartość: 1), lub nie uwzględniać (wartość: 0) składnik N^{cont} w sumie (3.11).

- `compute_stats`

Możliwe wartości są liczbami 0 lub 1 (domyślnie: 0) decydującymi czy

zapisywać (wartość: 1), lub nie zapisywać (wartość: 0) w pliku określonym poprzez `tensor_file_name` dodatkowe informacje statystyczne.

Do najczęściej stosowanych parametrów zaliczyć należy: `progress_script` i `tensor_file_name`. Parametrami `fidelity_level` i `max_no_sum_elements` operujemy, gdy chcemy podwyższyć lub obniżyć domyślny poziom akceptowalnych błędów. Parametr `z_period` jest niewątpliwie też ważny, ale tylko dla modelowania specyficznych przypadków. Reszta parametrów ma mniejsze znaczenie.

6.2.3 Podsumowanie

Przedstawiony w ust. 6.2 fragment pliku konfiguracyjnego należy zmodyfikować w następujący sposób, aby zamiast modelowania prostopadłościennej próbki analizować nieskończoną belkę, której oś jest równoległa do osi z , korzystając z 1D PBC:

```

...
# Wymiary okna modelowania: 10nm x 20nm x 40nm
Specify Oxs_BoxAtlas:atlas {
    xrange { 0 10e-9 }
    yrange { 0 20e-9 }
    zrange { 0 40e-9 }
}
# Oddziaływanie wymienne. Stała wymiany: 13 pJ/m
# 1D PBC wzdłuż osi z
Specify Klm_UniformExchange {
    A      13e-12
    kernel "6ngbrzperiod"
}
# Oddziaływanie dipolowe
# 1D PBC wzdłuż osi z
Specify Klm_Demag_PBC {
}
...

```

Na zakończenie warto przypomnieć ograniczenia zaimplementowanej metody narzucania periodycznych warunków brzegowych:

- Periodyczne warunki brzegowe w jednym wymiarze, wzdłuż osi z.
- Stosowane są kubiczne komórki sieci.
- Niewykorzystanie periodyczności opisanej w punkcie C) ust. 3.2. Implementacja takiej funkcjonalności jest trudna ze względu na skomplikowaną strukturę klasy `Oxs_Demag`. W celach testowych dokonałem takiej implementacji w pomocniczej klasie `Klm_SimpleDemag_PBC`, będącej odpowiednikiem klasy `Oxs_SimpleDemag`, która jest standardowym elementem programu OOMMF. Rezultaty tego testu są zgodne z oczekiwaniami: w sprzyjających warunkach można zrezygnować z procesu „uzupełniania zerami” i znacznie przyspieszyć obliczenia (patrz ust. 3.2).
- Niewykorzystanie niektórych symetrii, które mogłyby przyspieszyć obliczenia (np. parzystości/nieparzystości elementów $N_{\alpha\beta}$).

Literatura

- [1] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*, Oxford University Press, New York (2003).
- [2] International Technology Roadmap for Semiconductors (2005). Patrz: <http://www.itrs.net/>.
- [3] G.M. Whitesides, B. Grzybowski, *Science* **295** (2002) 2418.
- [4] V.V. Osipov, A.M. Bratkovsky, *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 2118.
- [5] J.R. Heath, P.J. Kuekes, G.S. Snider, R.S. Williams, *Science* **280** (1998) 1716.
- [6] D.J. Sellmyer, M. Zheng, R. Skomski, *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (2001) R433.
- [7] M. Demand, A. Encinas Oropesa, S. Kenane, U. Ebels, I. Huynen, L. Piraux, J. *Magn. Magn. Mater.* **249** (2002) 228.
- [8] C.L. Dennis, R.P. Borges, L.D. Buda, U. Ebels, J.F. Gregg, M. Hehn, E. Jouguelet, K. Ounadjela, I. Petej, I.L. Prejbeanu, M.J. Thornton, *J. Phys.: Condens. Matter* **14** (2002) R1175.
- [9] P.S. Fodor, G.M. Tsoi, L.E. Wenger, *J. Appl. Phys.* **91** (2002) 8186.
- [10] R. Wieser, U. Nowak, K.D. Usadel, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 64401.
- [11] O. Kazakova, D. Erts, T.A. Crowley, J.S. Kulkarni, J.D. Holmes, *J. Magn. Magn. Mater.* **286** (2005) 171.
- [12] C.H. Kim, H.J. Chun, D.S. Kim, S.Y. Kim, J. Park, J.Y. Moon, G. Lee, J. Yoon, Y. Jo, M.-H. Jung, S.I. Jung, C.J. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 223103.
- [13] M. Liu, L. Jalal, H. Imrane, C. Pettiford, J. Lou, S. Yoon, V.G. Harris, C. Vittoria, N.X. Sun, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 103105.
- [14] T.A. Crowley, K.J. Ziegler, D.M. Lyons, D. Erts, H. Olin, M.A. Morris, J.D. Holmes, *Chem. Mater.* **15** (2003) 3518.
- [15] B. Jianchun, X. Zheng, H. Jianming, M. Xiang, L. Zuhong, *Scripta-Materialia* **50** (2004) 19.
- [16] Y.C. Sui, R. Skomski, K.D. Sorge, D.J. Sellmyer, *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 1525.
- [17] T.A. Crowley, B. Daly, M.A. Morris, D. Erts, O. Kazakova, J.J. Boland, B. Wu, J.D. Holmes, *J. Mater. Chem.* **15** (2005) 2408, <http://www.rsc.org/publishing/journals/JM/article.asp?doi=b502155c>.
- [18] K. Nielsch, F.J. Castaño, S. Matthias, W. Lee, C.A. Ross, *Advanced Engineering Materials* **7** (2005) 217.
- [19] K. Nielsch, F.J. Castano, C.A. Ross, R. Krishnan, *J. Appl. Phys.* **98** (2005) 34318.
- [20] M. Dolz, W. Bast, D. Antonio, H. Pastoriza, J. Curiale, R.D. Sanchez, A.G. Leyva, *arXiv:cond-mat/0709.1707* (2007).
- [21] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir, E.E. Vogel, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 102501.
- [22] O. Kazakova, B. Daly, J.D. Holmes, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 184413.
- [23] W.F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, John Wiley, New York (1963).
- [24] S.D. Bader, *Reviews of Modern Physics* **78** (2006) 1.
- [25] R. Skomski, *J. Phys.: Condens. Matter* **15** (2003) R841.
- [26] W.F. Brown, Jr., A.E. LaBonte, *J. Appl. Phys.* **36** (1965) 1380.
- [27] A.E. LaBonte, *J. Appl. Phys.* **40** (1969) 2450.
- [28] M.J. Donahue, D.G. Porter, *Raport NISTIR 6376*, NIST, Gaithersburg, MD (1999). Patrz: <http://math.nist.gov/oommf>.
- [29] <http://nmag.soton.ac.uk/nmag/>.

- [30] I.Z. Rahman, A. Boboc, K.M. Razeed, M.A. Rahman, J. Magn. Magn. Mater. **290-291** (2005) 246.
- [31] R. Hertel, J. Magn. Magn. Mater. **249** (2002) 251.
- [32] H. Forster, T. Schrefl, R. Dittrich, D. Suess, W. Scholz, V. Tsiantos, J. Fidler, K. Nielsch, H. Hofmeister, H. Kronmuller, S. Fischer, IEEE Trans. Magn. **38** (2002) 2580.
- [33] R. Ferre, Comput. Phys. Commun. **105** (1997) 169.
- [34] A.P. Chen, N.A. Usov, J.M. Blanco, J. Gonzalez, J. Magn. Magn. Mater. **316** (2007) e317.
- [35] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, E.E. Vogel, P. Vargas, J. Magn. Magn. Mater. **308** (2007) 233.
- [36] J. Lee, D. Suess, T. Schrefl, K.H. Oh, J. Fidler, J. Magn. Magn. Mater. **310** (2007) 2445.
- [37] M. Born, Atomtheorie des festen Zustandes (Dynamik der Kristallgitter), tom 25, G. B. Teubner, Leipzig-Berlin (1923), rozdz. 18, str. 587.
- [38] M. Born, K. Huang, Dynamical theory of crystal lattices, Clarendon Press, Oxford, UK (1956), rozdz. II, str. 45.
- [39] M.J. Vos, R.L. Brott, J.G. Zhu, L.W. Carlson, IEEE Trans. Magn. **29** (1993) 3652.
- [40] D.V. Berkov, N.L. Gorn, Phys. Rev. B **57** (1998) 14332.
- [41] D.M. Apalkov, P.B. Visscher, IEEE Trans. Magn. **39** (2003) 3478.
- [42] P.P. Ewald, Physic Z. **14** (1913) 465.
- [43] K.M. Lebecki, <http://info.ifpan.edu.pl/~lebecki/pbc.htm>.
- [44] O. Nedelko, praca Ph.D., Instytut Fizyki PAN, Warszawa 2004.
- [45] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley, New York, NJ, USA (1975).
- [46] D.A. Garanin, Phys. Rev. B **55** (1997) 3050.
- [47] R. Dittrich, T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, H. Forster, J. Fidler, J. Magn. Magn. Mater. **250** (2002) L12.
- [48] W.F. Brown, Jr., Phys. Rev. **58** (1940) 736.
- [49] W.F. Brown, Jr., J. Appl. Phys. **33** (1962) 3026.
- [50] A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism, Oxford University Press, New York (2000).
- [51] L. Landau, E. Lifshitz, Phys. Z. Sowjetunion **8** (1935) 153.
- [52] T.L. Gilbert, Phys. Rev. **100** (1955) 1243, abstract only; a full report of this work is contained in Armour Research Foundation Project No. A059, Supplementary Report, May 1, 1956.
- [53] M. Labrune, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mater. **151** (1995) 231.
- [54] K. Ramstock, T. Leibl, A. Hubert, J. Magn. Magn. Mater. **135** (1994) 97.
- [55] W. Scholz, praca Ph.D., Technischen Universitaet Wien, Vienna 2003.
- [56] V. Tsiantos, W. Scholz, D. Suess, T. Schrefl, J. Fidler, J. Magn. Magn. Mater. **242-245** (2002) 999.
- [57] M.J. Donahue, R.D. McMichael, IEEE Trans. Magn. **43** (2007) 2878.
- [58] M.J. Donahue, D.G. Porter, Physica B **343** (2004) 177.
- [59] W.F. Brown, Jr., Magnetostatic Principles in Ferromagnetism, North-Holland Publ., Amsterdam (1962).
- [60] E. Schlomann, J. Appl. Phys. **33** (1962) 2825.
- [61] R. Moskowitz, E. Della Torre, IEEE Trans. Magn. **2** (1966) 739.
- [62] J.A. Osborn, Phys. Rev. **67** (1945) 351.
- [63] A.J. Newell, W. Williams, D.J. Dunlop, J. Geophys. Res., [Atmos.] **98** (1993) 9551.
- [64] M.E. Schabes, A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **MAG-23** (1987) 3882.

- [65] M. Maicus, E. Lopez, M.C. Sanchez, C. Aroca, P. Sanchez, IEEE Trans. Magn. **34** (1998) 601.
- [66] H. Fukushima, Y. Nakatani, N. Hayashi, IEEE Trans. Magn. **34** (1998) 193.
- [67] J. Fidler, T. Schrefl, D. Suess, O. Ertl, M. Kirschner, G. Hrkac, Physica B **372** (2006) 312.
- [68] T. Schrefl, informacja prywatna, Neapol 2007.
- [69] J.-G. Zhu, H.N. Bertram, J. Appl. Phys. **63** (1988) 3248.
- [70] Michael Scheinfein: komercyjny program LLG Micromagnetics Simulator™, Thomas Schrefl: program własny, Hans Fangohr: program 'nmag'. Informacja prywatna, 2006 i 2007.
- [71] D.V. Berkov, J. Magn. Magn. Mater. **161** (1996) 337.
- [72] M. Mansuripur, R. Giles, IEEE Trans. Magn. **24** (1988) 2326.
- [73] D.V. Berkov, N.L. Gorn, IEEE Trans. Magn. **38** (2002) 2474.
- [74] L. Greengard, V. Rokhlin, J. Comput. Phys. **73** (1987) 325.
- [75] M.R. Scheinfein, <http://llgmicro.home.mindspring.com/>.
- [76] Michael Scheinfein, informacja prywatna, 2007.
- [77] W. Scholz, J. Fidler, T. Schrefl, D. Suess, R. Dittrich, H. Forster, V. Tsiantos, Computational Materials Science **28** (2003) 366.
- [78] D.V. Berkov, N.L. Gorn, <http://www.micromagus.de/>.
- [79] K.M. Lebecki, M.J. Donahue, M.W. Gutowski, J. Phys. D: Appl. Phys. (w recenzji).
- [80] E.O. Brigham, The Fast Fourier Transform and Its Applications, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1988), rozdz. 7, str. 118.
- [81] D. Donnelly, B. Rust, Computing in Science and Engineering **7** (2005) 80.
- [82] M.J. Donahue (w przygotowaniu).
- [83] E.H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, Phys. Rev. **106** (1957) 446.
- [84] A. Aharoni, S. Shtrikman, Phys. Rev. **109** (1958) 1522.
- [85] J.R. Sandercock, W. Wetling, J. Appl. Phys. **50** (1979) 7784.
- [86] R. Ferre, Computational Materials Science **10** (1998) 278.
- [87] C.R. Chang, C.M. Lee, J.S. Yang, Phys. Rev. B **50** (1994) 6461.
- [88] C.M. Lee, C.R. Chang, Mater. Chem. Phys. **43** (1996) 183.
- [89] K.M. Lebecki, Mater. Sci.-Poland (przyjęte do druku).
- [90] Chang, C.R. (informacja prywatna), 2006.
- [91] X. Liu, M.M. Steiner, R. Sooryakumar, G.A. Prinz, R.F.C. Farrow, G. Harp, Phys. Rev. B **53** (1996) 12166.
- [92] J.A. Wolf, J.J. Krebs, Y.U. Idzerda, G.A. Prinz, J. Appl. Phys. **76** (1994) 6452.
- [93] E.L. Silva, W.C. Nunes, M. Knobel, J.C. Denardin, D. Zanchet, K. Pirota, D. Navas, M. Vazquez, Physica B **384** (2006) 22.
- [94] W.H. Meiklejohn, C.P. Bean, Phys. Rev. **102** (1956) 1413.
- [95] K.M. Lebecki, O. Kazakova, M.W. Gutowski, Physica B **403** (2008) 360.
- [96] B.X. Gu, H. Wang, J. Magn. Magn. Mater. **187** (1998) 47.
- [97] P. Vavassori, O. Donzelli, M. Grimsditch, V. Metlushko, B. Ilic, J. Appl. Phys. **101** (2007) 023902.
- [98] M. Grimsditch, P. Vavassori, J. Phys.: Condens. Matter **16** (2004) R275.
- [99] J. Fidler, T. Schrefl, V.D. Tsiantos, W. Scholz, D. Suess, H. Forster, J. Appl. Phys. **91** (2002) 7974.
- [100] <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>.
- [101] W.F. Brown, Phys. Rev. **130** (1963) 1677.
- [102] J.L. García-Palacios, F.J. Lázaro, Physical Review B **58** (1998) 14937.
- [103] B.B. Welch, Practical Programming in Tcl and Tk, Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, USA (2003).

