

7. Элькин, М. Д. Внутримолекулярная динамика и её математическое описание в задачах молекулярной спектроскопии и газовой электронографии / М. Д. Элькин, Э. К. Костерина // Химическая физика. – 1994. – Т. 10, № 1. – С. 38–42.
8. Элькин, М. Д. К вопросу об использовании функции плотности вероятности в ангармонической теории рассеяния электронов молекулами / М. Д. Элькин // Журнал структурной химии. – 1989. – Т. 30, № 6. – С. 33–37.
9. Элькин, М. Д. Кинематическая ангармоничность в электронно-графических исследованиях геометрии молекул // Журнал структурной химии. – 1986. – Т. 27. – С. 42–46.
10. Элькин, М. Д. Колебательные спектры конформеров бензофенона / М. Д. Элькин, Е. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 5. – С. 563–568.
11. Элькин, М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия Саратовского университета. – 2008. – Т. 8, № 2. – С. 24–30. – (Новая сер. Химия).
12. Элькин, М. Д. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний пятичленных циклических соединений / М. Д. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Вестник Сарат. гос. техн. ун-та. – 2006. – № 4, вып. 4. – С. 38–44.
13. Элькин, П. М. Квантово-химический расчет нормальных колебаний молекул замещенных пятичленных халькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма анализ структуры и спектров пятичленных циклических соединений / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.
14. Элькин, П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний полихлорзамещенных дибензо-п-диоксинов / П. М. Элькин, М. А. Эрман // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 1. – С. 21–24.
15. Элькин, П. М. Теоретический анализ таутомерных форм пурина / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75, № 1. – С. 23–27.
16. Amat, G. Rotation-vibration of polyatomic molecules / G. Amat, H. H. Nielsen, G. Torrago. – N.Y., 1971. – 580 c.
17. Frisch, M. J. Gaussian 03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh, 2003.
18. Yoshida, H. New Approach to Vibrational Analysis of Large Molecules by Density Functional Theory: Wavenumber-Linear Scaling Method / H. Yoshida, K. Takeda, J. Okamura, A. Ehara, H. A. Matsura // J. Phys. Chem. A. – 2002. – Vol. 106, № 14. – P. 3580–3586.

УДК 538.221/681.3.06

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ДОМЕНОВ ВО ВРАЩАЮЩЕМСЯ ПОЛЕ

В.В. Смирнов, Е.А. Джалмухамбетова, А.У. Джалмухамбетов

Составлены дифференциальные уравнения, описывающие динамику цилиндрического магнитного домена во вращающемся поле и его взаимодействие с точечным дефектом пленки при наличии вязкого трения. На основе численного решения этих уравнений с использованием программного пакета Mathcad моделируются различные сценарии динамики домена. Влияние дефекта описывается гауссовой потенциальной функцией.

Ключевые слова: магнитный домен, ЦМД, доменная граница, магнитостатическая ловушка, моделирование динамики домена.

Key words: magnetic domain, magnetic bubble, domain wall, magnetic static trap, modeling of domain dynamic.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Цилиндрические магнитные домены (ЦМД), созданные в монокристаллических пленках феррит-гранатов, могут продвигаться в плоскости пленки с помощью магнитных ловушек. В методе вращающегося поля магнитная ловушка заставляет двигаться домен по траектории, близкой к окружности. При этом на его динамику сильно влияет наличие микродефектов пленки [1]. Изучение различных аспектов такого влияния численными методами можно проводить на основе предлагаемой в данной работе математической модели.

Модель магнитной ловушки и динамические уравнения. Рассмотрим плоское движение центра ЦМД в поле движущейся центрально-симметричной потенциальной ямы, моделирующей магнитную ловушку. Для этого введем две двумерные системы отсчета, лежащие в плоскости магнитной пленки. В абсолютной системе отсчета, неподвижно связанной с пленкой, декартовы координаты центра домена обозначим x и y , а в подвижной системе, связанной с центром магнитной ловушки, $-\xi$ и η . При движении центра ловушки координатные оси ξ и η остаются параллельными осям x и y соответственно. Координаты центра движущейся потенциальной ловушки относительно неподвижной системы задаются как функции времени $R_x(t)$ и $R_y(t)$. Координаты частицы связаны следующим образом:

$$x = R_x + \xi; y = R_y + \eta \quad (1)$$

Движение ЦМД обеспечивается изменением со временем положения потенциальной ямы, которая выступает в роли магнитной ловушки. В координатах ξ и η относительно центра потенциал можно представить функцией вида:

$$U(\xi, \eta) = -U_0 \exp\left\{-\frac{1}{a^2}[\xi^2 + \eta^2]\right\}. \quad (2)$$

Параметр U_0 определяет интенсивность взаимодействия ЦМД с ловушкой, а параметр a – эффективный радиус этого взаимодействия.

Такая модель взаимодействия имеет определенные положительные стороны. Функция является ограниченной и дифференцируемой на всей плоскости, поэтому уравнения движения ЦМД будут интегрируемыми. Несмотря на простоту, данная модель взаимодействия позволяет отразить основные черты движения ЦМД под действием вращающегося поля.

На ЦМД со стороны магнитной ловушки будет действовать потенциальная сила, пропорциональная градиенту функции $U(x, y, t)$:

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}; F_y = -\frac{\partial U}{\partial y} \quad (3)$$

Если на ЦМД действует только ловушка, то динамические уравнения его движения в абсолютных координатах x, y можно записать в виде:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{2U_0}{a^2} (x - R_x) \exp\left(-\frac{1}{a^2}[(x - R_x)^2 + (y - R_y)^2]\right) \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} = -\frac{2U_0}{a^2} (y - R_y) \exp\left(-\frac{1}{a^2}[(x - R_x)^2 + (y - R_y)^2]\right) \end{cases}, \quad (4)$$

где m – эффективная масса домена, характеризующая его инертность. Если в уравнениях (4) перейти к координатам ξ и η относительно центра ловушки, то получаем систему уравнений:

$$m \frac{d^2 \xi}{dt^2} = -m \frac{d^2 R_x}{dt^2} - \frac{2U_0}{a^2} \xi \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right), \quad (5a)$$

$$m \frac{d^2 \eta}{dt^2} = -m \frac{d^2 R_y}{dt^2} - \frac{2U_0}{a^2} \eta \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right). \quad (5b)$$

Первые слагаемые в правой части (5) представляют собой проекции переносной силы инерции, а вторые слагаемые – проекции силы действия ловушки.

Помимо потенциальной силы (3), действующей на ЦМД, необходимо в динамической модели учесть диссипативные процессы. При наличии сухого трения практически невозможно проинтегрировать динамические уравнения. Поэтому полагаем, что на домен со стороны магнитной пленки действует только сила вязкого трения, пропорциональная скорости. С учетом силы трения динамические уравнения (5) в относительных переменных ξ и η принимают вид:

$$m \frac{d^2 \xi}{dt^2} = -m \frac{d^2 R_x}{dt^2} - \frac{2U_0}{a^2} \xi \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right) - \sigma \frac{dR_x}{dt} - \sigma \frac{d\xi}{dt}, \quad (6a)$$

$$m \frac{d^2 \eta}{dt^2} = -m \frac{d^2 R_y}{dt^2} - \frac{2U_0}{a^2} \eta \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right) - \sigma \frac{dR_y}{dt} - \sigma \frac{d\eta}{dt}, \quad (6б)$$

где σ – коэффициент сопротивления. Разделим уравнения (6) на массу m и введем обозначения для коэффициентов уравнения:

$$\omega_0^2 = \frac{2U_0}{ma^2} \text{ и } \gamma = \frac{\sigma}{m}. \quad (7)$$

После этого система связанных дифференциальных уравнений относительного движения принимает вид:

$$\frac{d^2 \xi}{dt^2} + \gamma \frac{d\xi}{dt} + \omega_0^2 \xi \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right) = -\left(\frac{d^2 R_x}{dt^2} + \gamma \frac{dR_x}{dt}\right), \quad (8a)$$

$$\frac{d^2 \eta}{dt^2} + \gamma \frac{d\eta}{dt} + \omega_0^2 \eta \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right) = -\left(\frac{d^2 R_y}{dt^2} + \gamma \frac{dR_y}{dt}\right), \quad (8б)$$

Для решения этой системы необходимо задать закон движения центра ловушки. В методе вращающегося поля полагаем, что центр ловушки движется по окружности радиуса R с угловой скоростью Ω :

$$R_x = R \cos \Omega t, R_y = R \sin \Omega t. \quad (9)$$

Начальную фазу вращения полагаем нулевой, поэтому $R_x(0) = R, R_y(0) = 0$.

Взаимодействие ЦМД с локальным дефектом МПФГ. Динамика ЦМД зависит от его взаимодействия с дефектами, которые всегда имеются в магнитной пленке. Реальные механизмы этого взаимодействия сложны и разнообразны [2, 3]. Они могут зависеть от многих факторов: размеров и концентрации дефектов, их магнитных свойств, формы, толщины доменных стенок ЦМД и др. В этих условиях не представляется возможным не только решить, но и составить уравнения движения ЦМД без допущений.

Если в процессе движения ЦМД его стенка оказалась в месте расположения дефекта, то энергия системы «пленка + ЦМД» изменится (увеличится или уменьшится) вследствие взаимодействия дефекта со стенкой ЦМД. Предположим, что энергия U_d взаимодействия ЦМД с одиночным дефектом, расположенным в точке с координатами x_1 и y_1 , зависит от расстояния до центра ЦМД в точке x и y таким образом, что эта энергия будет иметь экстремум, когда это расстояние будет равно радиусу ЦМД.

В точке с координатами x_1 и y_1 находится локальный дефект магнитной пленки, который взаимодействует с ЦМД, продвигаемым полем вращающейся магнитной ловушки. Это взаимодействие будем моделировать потенциальной функцией вида

$$U_d = -V_d \cdot \left[\exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{b^2}\right) - \alpha \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{c^2}\right) \right], \quad (10)$$

где $\xi = x - x_1$ и $\eta = y - y_1$ – координаты центра ЦМД относительно центра дефекта. Константа V_d определяет интенсивность взаимодействия и является варьируемым параметром

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

модели. Положительные параметры b и c определяют область взаимодействия. Их значения близки радиусу ЦМД и задаются в единицах a соответствующего параметра магнитной ловушки. Для определенности полагаем $b > c$, так как случай $b < c$ можно рассматривать и при условии $b > c$, если положить $V_d < 0$. Положительные параметры α и ϵ определяют форму и асимметрию потенциальной функции соответственно. Параметр асимметрии ϵ позволяет, в частности, учитывать эллиптичность ЦМД.

В такой модели взаимодействия мы пренебрегаем диссипативными гистерезисными явлениями, гироскопическими эффектами и изменениями эффективной массы в результате взаимодействия. На основе данной модели можно рассматривать взаимодействие ЦМД не только с одним единственным дефектом, но и с несколькими дефектами одновременно.

Результаты моделирования динамики ЦМД в среде Mathcad. Для численного решения системы динамических уравнений воспользуемся пакетом программ Mathcad, который имеет встроенную функцию *rkfixed* для решения систем дифференциальных уравнений, реализующую метод Рунге-Кутты четвертого порядка с фиксированным шагом [4].

Применительно к численным расчетам были введены безразмерные переменные и варьируемые при вычислениях постоянные. Все линейные величины: абсолютные координаты x и y ; координаты ξ и η относительно центра ловушки, начальные координаты x_0 и y_0 центра ЦМД; координаты локального дефекта x_1 и y_1 ; линейные параметры R , b и c – задаются и рассчитываются в единицах параметра ловушки a .

За единицу времени принимается величина, обратная угловой скорости Ω вращения поля, т.е. Ω^{-1} . Поэтому единицей скорости является величина $a\Omega$. Хотя проекции v_{x0} и v_{y0} начальной скорости ЦМД можно задавать произвольным образом, мы полагали их равными нулю, чтобы уменьшить число варьируемых постоянных. Эффективная масса m включается в коэффициенты динамических уравнений. Постоянная вязкого трения γ в безразмерном виде представляет собой величину $\sigma/(ma\Omega)$. Сила постоянная U_0 движущейся ловушки определяет безразмерный коэффициент

$$V = \frac{2U_0}{ma^2\Omega^2} = \left(\frac{\omega_0}{\Omega}\right)^2, \quad (11)$$

а постоянная V_d взаимодействия ЦМД с неподвижным дефектом входит в вычисляемую постоянную

$$W = \frac{2V_d\alpha}{mc^2\Omega^2} = V\alpha\left(\frac{V_d}{U_0}\right)\left(\frac{a}{c}\right)^2 = V\alpha\kappa\left(\frac{a}{c}\right)^2, \quad (12)$$

где $\kappa = V_d/U_0$ – задаваемое отношение. Значение функции взаимодействия ЦМД с дефектом на линии экстремума определяет ее «глубину»

$$h = -\frac{\kappa V \delta (2 + \delta)}{(1 + \delta)^2} \exp\left[-\frac{\ln(\alpha(1 + \delta)^2)}{\delta(2 + \delta)}\right], \quad (13)$$

которая дает представление о соотношении энергии взаимодействия ЦМД с магнитной ловушкой и энергии его взаимодействия с дефектом. Здесь использовано обозначение h вместо $U_{\text{экстр}}$.

Для удобного использования возможностей пакета Mathcad динамические уравнения движения запишем в виде:

$$\frac{dx}{dt} = v_x, \quad \frac{dy}{dt} = v_y, \quad (14)$$

$$\frac{dv_x}{dt} = F_x^e + F_x^d - \gamma \cdot v_x, \quad \frac{dv_y}{dt} = F_y^e + F_y^d - \gamma \cdot v_y. \quad (15)$$

Здесь проекции потенциальных сил представлены функциями координат и времени:

$$F_x^e = -V(x - R \cdot \cos t) \cdot \exp\left(-\left((x - R \cdot \cos t)^2 + (y - R \cdot \sin t)^2\right)\right), \quad (16)$$

$$F_y^e = -V(y - R \cdot \sin t) \cdot \exp\left(-\left((x - R \cdot \cos t)^2 + (y - R \cdot \sin t)^2\right)\right), \quad (17)$$

$$F_x^d = -W \cdot (x - x_1) \left[\exp\left(-\frac{(x - x_1)^2 + \varepsilon^2 (y - y_1)^2}{c^2}\right) - \beta \exp\left(-\frac{(x - x_1)^2 + \varepsilon^2 (y - y_1)^2}{c^2}\right) \right] \quad (18)$$

$$F_y^d = -\varepsilon^2 W \cdot (y - y_1) \left[\exp\left(-\frac{(x - x_1)^2 + \varepsilon^2 (y - y_1)^2}{c^2}\right) - \beta \exp\left(-\frac{(x - x_1)^2 + \varepsilon^2 (y - y_1)^2}{c^2}\right) \right] \quad (19)$$

где введен параметр $\beta = (c/b)^2/\alpha$.

Задавая значения безразмерного параметра ε асимметрии взаимодействия ЦМД с дефектом, можно изменять ориентацию дефекта относительно скорости ЦМД только на 90° . Но соответствующим выбором расположения дефекта (x_1 и y_1) на различных участках траектории ловушки можно практически обеспечить любую ориентацию дефекта на плоскости относительно направления скорости [5, 6]. Это обеспечивает возможность исследования динамики от взаимной ориентации ЦМД и дефекта без усложнения модели.

На основе численного решения динамических уравнений (14) – (15) с силовыми функциями (16) – (17) при заданных начальных значениях переменных (x_0, y_0, v_{x0}, v_{y0}) и значениях параметров Mathcad формируем матрицу решений, представляющих собой дискретные значения переменных: t, x, y, v_x, v_y . Целочисленный параметр i параметр определяет сетку решения.

По матрице решений определяются траектории центра ЦМД, как в абсолютных координатах, так и в переменных относительно локального дефекта и переменных относительно центра ловушки. Рассчитывалась также временная зависимость отклонения центра домена от центра движущейся по окружности радиуса R ловушки и проекций скорости.

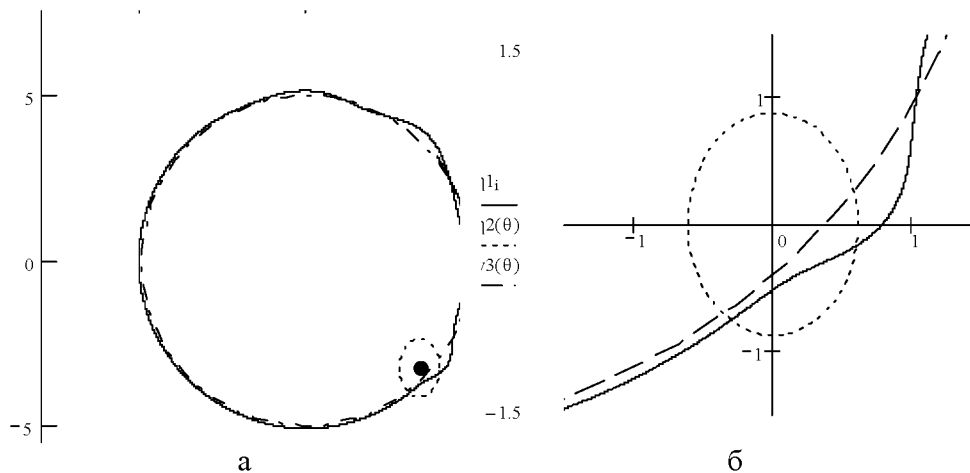


Рис. 1. Траектория ЦМД во вращающемся поле: а – относительно пленки; б – относительно дефекта. Сплошная кривая – траектория ЦМД; штрих-пунктирная – траектория центра магнитной ловушки; пунктирная – линия экстремума потенциала дефекта

Время движения в единицах Ω^{-1} задавалось от $t_0 = 0$ до $t_{max} = 7 \div 20$. Начальные скорости v_{x0} и v_{y0} полагали нулевыми, а модули начальных координат – близкими к траектории центра ловушки: $x_0 = 5,3$ и $y_0 = 0,3$. Радиус траектории центра магнитной ловушки принял

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

$R = 5$. На рис. 1 приведены расчетные кривые при заданных значениях параметров: $V = 70$; $\kappa = 1,6$; $\gamma = 3$; $\varepsilon = 0,7$; $\alpha = 1,1$; $b = 0,6$; $c = 0,5$. Так как $\kappa > 0$, имеем случай «притяжения» доменной стенки дефектом. Значения вычисленных безразмерных параметров при этом составили: $W = 492,8$; $A = 0,613$; $B = 0,876$; $h = -12,031$.

Из анализа этих кривых видно, что при захвате ЦМД движущейся магнитной ловушкой возникают затухающие осцилляции относительно некоторого равновесного положения в ловушке. Они вновь возбуждаются при «столкновении» с дефектом. Такой характер движения ЦМД «наблюдается» для значений параметров в достаточно широких пределах, как для «притяжения» стенки дефектом, так и для «отталкивания».

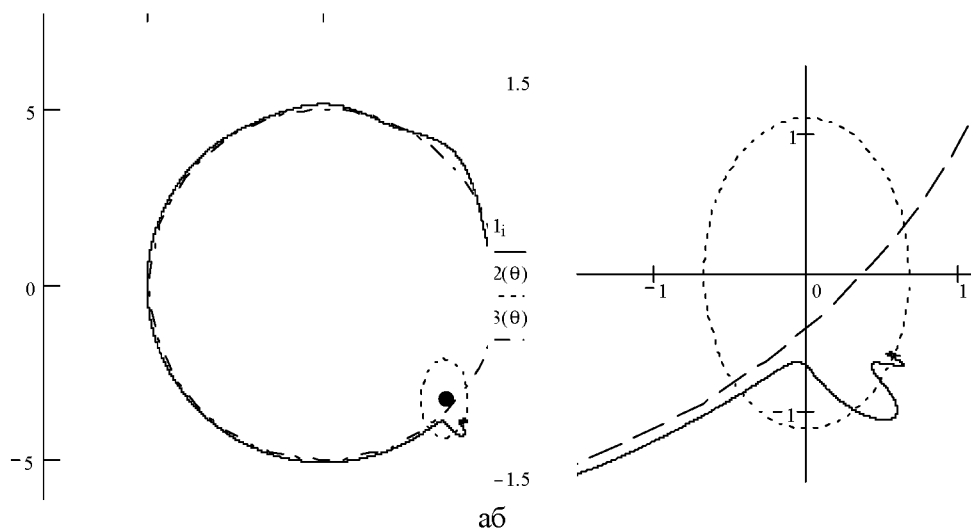


Рис. 2. Траектория ЦМД во вращающемся поле:
а – относительно пленки; б – относительно дефекта

Расчеты показывают, что возможен сценарий, когда ЦМД захватывается дефектом. Расчетные кривые для одного из таких случаев приводятся на рис. 2. Соответствующие значения параметров таковы: $V = 70$; $\kappa = 2,5$; $\gamma = 3$; $\varepsilon = 0,6$; $\alpha = 1,5$; $b = 0,6$; $c = 0,45$. Здесь также $\kappa > 0$, поэтому имеет место «притяжение» доменной стенки дефектом. Значения вычисленных безразмерных параметров составили: $W = 1296$; $A = 0,674$; $B = 1,123$; $h = -21,694$.

По форме траектории видно, что ЦМД, захваченный дефектом, теряет связь с движущейся магнитной ловушкой и совершает колебания вдоль линии минимума потенциала взаимодействия до полной остановки. Стенка ЦМД удерживается дефектом, а его центр движется вокруг дефекта примерно на расстоянии, равном радиусу ЦМД.

Возможен сценарий захвата ЦМД дефектом и при отталкивании доменной стенки дефектом, т.е. при $\kappa < 0$. Расчетные кривые для одного из подобных случаев приводятся на рис. 3. Соответствующие значения параметров таковы: $V = 70$; $\kappa = -1,5$; $\gamma = 3$; $\varepsilon = 0,6$; $\alpha = 1,3$; $b = 0,6$; $c = 0,45$. Значения вычисленных безразмерных параметров при этом составили: $W = -674,074$; $A = 0,623$; $B = 1,038$; $h = 15,646$. В таком случае центр ЦМД оказывается от дефекта на расстоянии меньше радиуса ЦМД.

Выбрана и обоснована потенциальная модель взаимодействия отдельного дефекта пленки, который влияет на динамику ЦМД. Введенные варьируемые параметры позволяют моделировать различные стороны влияния дефекта на ЦМД.

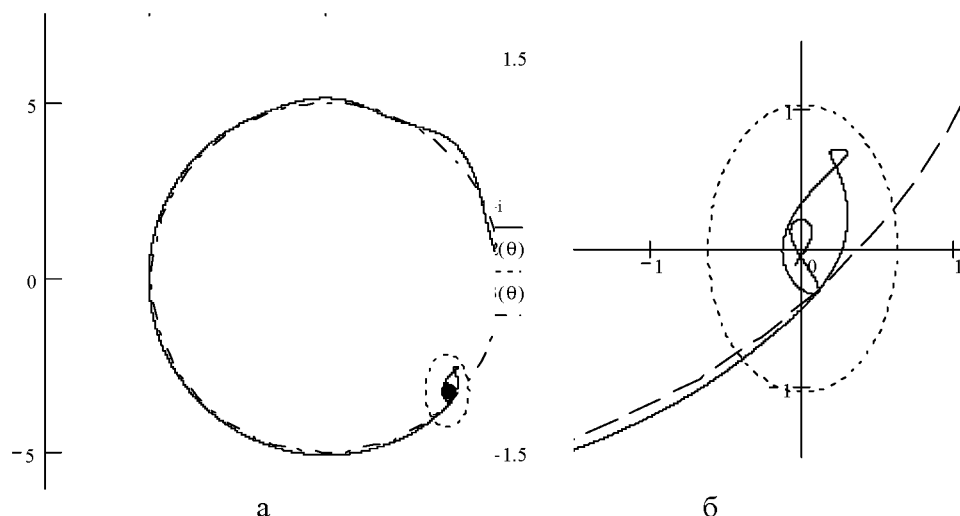


Рис. 3. Траектория ЦМД во вращающемся поле:
а – относительно пленки; б – относительно дефекта

Составлены дифференциальные уравнения, описывающие динамику ЦМД во вращающемся поле при наличии вязкого трения, как в абсолютных, так и в относительных координатах. Система динамических уравнений для ЦМД численно решается с использованием пакета Mathcad. Моделируются различные динамические сценарии.

Библиографический список

1. Григоренко, А. Н. Квазистатическое взаимодействие с дефектами и коэрцитивность уединенной доменной стенки в неоднородном поле в пленках на основе ИЖГ / А. Н. Григоренко, С. А. Мишин, Е. Г. Рудашевский // ФТТ. – 1990. – Т. 60, № 2. – С. 113–122.
2. Ландау, Л. Д. К теории дисперсии магнитной проницаемости в ферромагнитных телах / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц // Ландау Л. Д. Собрание трудов : в 2 т. / под ред. Е. М. Лифшица – М. : Наука, 1969. – Т. 1. – 128 с.
3. Малоземов, А. Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами / А. Малоземов, Дж. Слонзуски. – М. : Мир, 1982. – 384 с.
4. Тарасевич, Ю. Ю. Информационные технологии в математике / Ю. Ю. Тарасевич. – М. : СОЛОН-Пресс, 2003. – 144 с.
5. Элеменкин, В. Г. Влияние магнитных микродефектов на динамику ЦМД / В. Г. Элеменкин, В. В. Смирнов // ФТТ. – 1990. – Т. 19, № 7. – С. 2135–2136.
6. Bobeck, A. N. Properties and device applications of magnetic domain in orthoferrites / A. N. Bobeck // Bell Syst. Techn. – 1967. – Vol. 46, № 10. – P. 1901–1925.