

易轴取向对 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 双层膜退磁过程影响的微磁学分析*

夏静 张溪超 赵国平†

(四川师范大学物理与电子工程学院, 成都 610068)

(2013年7月21日收到; 2013年8月19日收到修改稿)

运用一维和三维微磁学模拟探究了易轴与外场存在偏角 β 情况下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 双层膜的磁矩反转过程, 计算了磁矩反转过程中磁滞回线和磁能积, 并与实验结果进行了对比. 计算结果表明, 在膜面内的易轴偏角 β 严重影响磁矩反转过程. 当 $\beta \neq 0^\circ$ 时, 磁矩反转过程中无明显成核现象, 随着易轴偏角 β 的增大, 剩磁显著减小, 磁滞回线方形度变差, 导致磁能积急剧减小. 对于 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10\text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8\text{ nm})$ 双层膜, $\beta = 10^\circ$ 时, 最大磁能积下降 30.3%. 在磁矩反转过程中, 总能量最大时对应的外磁场能随易轴偏角的增大而减小, 交换作用能先增大后减小, 磁晶各向异性性能则随着易轴偏角的增大而增大. 软磁相厚度越大, 双层膜的磁能积受易轴偏角影响越大. 在膜面外的易轴偏角对磁矩反转过程也有类似的影响.

关键词: 微磁学模拟, 磁晶易轴, 磁能积, 能量

PACS: 75.78.Cd, 75.30.Gw, 75.70.-i

DOI: 10.7498/aps.62.227502

1 引言

Kneller 和 Hawig^[1] 在 1991 年提出交换弹簧耦合材料的概念, 即利用软磁材料的高饱和磁化强度和硬磁相的高矫顽力改善复合材料的磁性能. Skomski 和 Coey^[2] 于 1993 年从理论上预测这类交换耦合材料的最大磁能积可达到 120 MGOe ($1\text{ Oe} = 79.5775\text{ A/m}$). 正是由于其超高的磁性能, 在过去的几十年中, 这类交换耦合材料得到了广泛研究^[3-23]. Asti 等^[4] 认为, 当双相磁性材料中软磁和硬磁的厚度比不同时, 材料会表现出不同的性质, 分别为刚性磁体、交换耦合磁体和退耦合磁体. 根据磁化率的计算公式, 他们计算出这三类磁体对应的软磁和硬磁的厚度, 即磁相图. Yan 等^[24] 通过在软磁层和硬磁层之间添加中间层来控制软磁层和硬磁层之间的耦合强度, 实验表明, 软磁相和硬磁相界面交换耦合作用降低, 导致软磁相成核场减小, 硬磁相发生不可逆偏转时的反转场增大, 这与 Deng

等^[25] 理论分析所得到的结果一致. 此外, Zhao 和 Wang^[7] 通过对能量极小值的求解与分析, 得到成核场与软磁相厚度有关的解析方程, 从解析方程可知, 成核场随着软磁相厚度的增加而减小. 此外, 还得到了软磁相厚度和硬磁相厚度都非常大时钉扎场的解析表达式. 虽然目前的交换耦合材料并未达到理论上预言的优异磁性能^[17,26,27], 但依然具有巨大潜力. 最近, Cui 等^[28] 合成的 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\text{FeCo}$ 最大磁能积已达 61 MGOe, 交换耦合材料的磁性能还有提升的空间, 值得进一步深入研究.

实验^[29,30] 发现, 当外场为零时, 磁性薄膜的磁矩与膜面不是绝对垂直或者平行, 同时磁矩在薄膜平面内也会有一定分布, 说明磁晶易轴有一定的分布, 与外加磁场不会完全平行, 存在有效偏角, 而在此之前的诸多计算模拟中采用的模型没有考虑磁晶易轴的有效偏角^[5,31,32]. 现有文献中也缺乏对磁矩退磁过程中能量变化的细致分析. 本文利用微磁学方法重点研究了磁晶易轴在膜面内与外加磁场

* 国家自然科学基金(批准号: 11074179)和四川省高等学校科研创新团队建设计划(批准号: 12TD008)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhaogp@uestc.edu.cn

存在一定偏角的情况下硬磁软磁双层膜的退磁过程,并分析了退磁过程中的磁性能.同时计算了易轴在膜面外与外场存在偏角情况下的磁滞回线,并与实验结果进行了比较.

2 模型与计算方法

本文采用的模型是硬磁/软磁双层膜模型,软磁相和硬磁相的厚度分别为 L^s 和 L^h ,如图 1 所示.需要指出的是,在计算中软磁相和硬磁相的磁晶各向异性均为单轴各向异性,而实际的软磁相(α -Fe)的磁晶各向异性是立方对称,即三个相互垂直的易轴.当磁矩在 xoy 平面(yoz 平面)内偏转时,软磁相的磁晶各向异性可表示为 $K^s(\sin^2\theta - \sin^4\theta)$,与单

轴各向异性相比,多出高次项 $-\sin^4\theta$.文献 [5] 指出,高次项对成核场没有影响,软磁相的各向异性相对硬磁相小两个量级,对钉扎场的影响很小.总之,采用单轴的各向异性来近似软磁相的立方各向异性,对计算结果影响并不大,却可以大大简化计算过程.所以在很多软磁相为 α -Fe 的双相材料的计算 [5,7,12,31,33,34] 中,采用单轴各向异性来近似软磁相的立方各向异性,本文也采取了这样的近似.图 1(a) 中,软磁相和硬磁相的磁晶易轴 (e) 和外场 H 均与膜面平行,易轴与外场 H 存在夹角 β .图 1(b) 中,外场垂直膜面,磁晶易轴在 yoz 平面内与外场存在夹角.计算中,假设膜面无限延伸,磁矩保持在膜面内偏转,从而将问题简化成便于模拟的一维模型 [5,7,8,33-37].

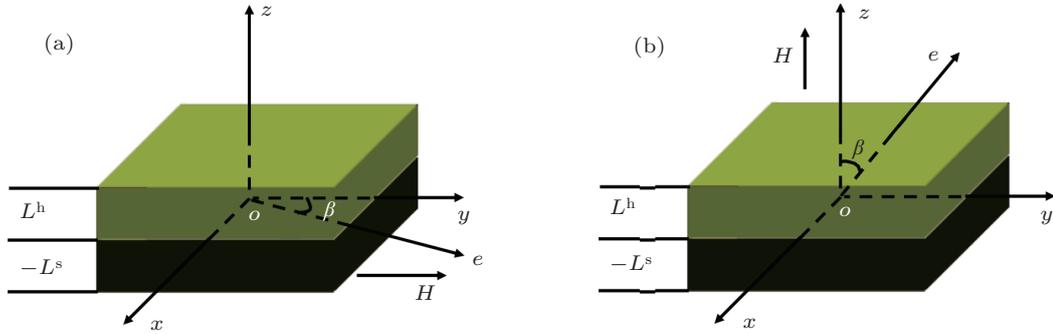


图 1 计算模型示意图 (a) 易轴在膜面内; (b) 易轴在膜面外

根据 Brown 的微磁学理论 [38], 当易轴在膜面内时体系的能量密度可表示为

$$F_{\parallel} = \int_0^{L^h} \left[A^h \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + K^h \sin^2(\theta - \beta) - HM_s^h \cos \theta \right] dz + \int_{-L^s}^0 \left[A^s \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + K^s \sin^2(\theta - \beta) - HM_s^s \cos \theta \right] dz; \quad (1)$$

当易轴在膜面外的体系的能量密度可表示为

$$F_{\perp} = \int_0^{L^h} \left[A^h \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + K^h \sin^2(\theta - \beta) - HM_s^h \cos \theta + 2\pi (M^h)^2 \cos^2 \theta \right] dz + \int_{-L^s}^0 \left[A^s \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + K^s \sin^2(\theta - \beta) - HM_s^s \cos \theta + 2\pi (M^s)^2 \cos^2 \theta \right] dz; \quad (2)$$

这里, A , K 和 M_s 分别表示交换作用常数、磁晶各向异性常数和饱和自发磁化强度,上标 h 和 s 分别表示硬磁层和软磁层, θ 表示磁化矢量和外场方向的夹角.

系统的边界条件 [5,7,8] 为

$$\begin{aligned} \theta|_{z=-L^s} &= \theta^s, \\ \theta|_{z=L^h} &= \theta^h, \\ \theta|_{z=0} &= \theta^0, \\ \frac{d\theta}{dz}|_{z=-L^s} &= 0, \\ \frac{d\theta}{dz}|_{z=L^h} &= 0. \end{aligned}$$

体系的能量积分包括硬磁层和软磁层的能量,将 (1) 和 (2) 式代入欧拉-拉格朗日方程 $\partial F / \partial \theta = \frac{d}{dz} \left(\partial F / \partial \frac{d\theta}{dz} \right)$, 求能量的极小值, 便可以得到磁矩方向 θ 与 z 的关系.

对于易轴在膜面内的体系, 可得

$$\int_{\theta}^{\theta^s} \frac{d\theta}{\sqrt{[\sin^2(\theta - \beta) - \sin^2(\theta^s - \beta)] - 2h^s(\cos\theta - \cos\theta^s)}} = \frac{L^s + z}{\Delta^s} \pi, \quad (3)$$

$$\int_{\theta^h}^{\theta} \frac{d\theta}{\sqrt{[\sin^2(\theta - \beta) - \sin^2(\theta^h - \beta)] - 2h^h(\cos\theta - \cos\theta^h)}} = \frac{L^h - z}{\Delta^h} \pi; \quad (4)$$

对于易轴在膜面外的体系, 可得

$$\int_{\theta}^{\theta^s} \frac{d\theta}{\sqrt{[\sin^2(\theta - \beta) - \sin^2(\theta^s - \beta)] - 2h^s(\cos\theta - \cos\theta^s) + \frac{2\pi(M^s)^2}{K^s}(\cos^2\theta - \cos^2\theta^s)}} = \frac{L^s + z}{\Delta^s} \pi, \quad (5)$$

$$\int_{\theta^h}^{\theta} \frac{d\theta}{\sqrt{[\sin^2(\theta - \beta) - \sin^2(\theta^h - \beta)] - 2h^h(\cos\theta - \cos\theta^h) + \frac{2\pi(M^h)^2}{K^h}(\cos^2\theta - \cos^2\theta^h)}} = \frac{L^h - z}{\Delta^h} \pi; \quad (6)$$

这里, h 是约化外场, $h = H/H_K$, 其中 $H_K = 2K/M_s$ 表示磁晶各向异性场; $\Delta = \pi(A/K)^{1/2}$ 为材料的布洛赫畴壁宽度, 衡量材料交换作用的影响范围. 体系的界面边界条件为

$$A^s \frac{d\theta}{dz} \Big|_{z=0^-} = A^h \frac{d\theta}{dz} \Big|_{z=0^+}.$$

将 (3) 和 (4) 式代入上式, 界面边界条件可改写成如下形式:

$$\begin{aligned} & A^s K^s [\sin^2(\theta^0 - \beta) - \sin^2(\theta^s - \beta) \\ & - 2h^s \cos\theta^0 + 2h^s \cos\theta^s] \\ & = A^h K^h [\sin^2(\theta^0 - \beta) - \sin^2(\theta^h - \beta) \\ & - 2h^h \cos\theta^0 + 2h^h \cos\theta^h]. \end{aligned} \quad (7)$$

对于易轴在膜面外的情况, 界面边界条件可改写为

$$\begin{aligned} & A^s K^s \left[\sin^2(\theta^0 - \beta) - \sin^2(\theta^s - \beta) - 2h^s \cos\theta^0 \right. \\ & \left. + 2h^s \cos\theta^s + \frac{2\pi(M^s)^2}{K^s} (\cos^2\theta^0 - \cos^2\theta^s) \right] \\ & = A^h K^h \left[\sin^2(\theta^0 - \beta) - \sin^2(\theta^h - \beta) - 2h^h \cos\theta^0 \right. \\ & \left. + 2h^h \cos\theta^h + \frac{2\pi(M^h)^2}{K^h} (\cos^2\theta^0 - \cos^2\theta^h) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

在本文的计算中, 双层膜系统中的软磁层采用 α -Fe, 硬磁层采用 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, 厚度保持为 10 nm 不变. 该厚度大于 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的布洛赫畴壁宽度 (4.2 nm), θ^h 服从 Stoner-Wohlfarth (SW) 模型^[7,8]. 这样就可利用 SW 模型在保证模拟准确度的情况

下简化计算. 在 SW 模型中, 忽略相邻原子的交换作用能, 只考虑原子的磁晶各向异性能和塞曼能. 对于易轴在膜面内的情况, 能量密度 E 可以表示为

$$E = K^h \sin^2(\theta^h - \beta) - M_s^h H \cos\theta^h;$$

对于易轴在膜面外的情况, 能量密度可表示为

$$\begin{aligned} E & = K^h \sin^2(\theta^h - \beta) - M_s^h H \cos\theta^h \\ & + 2\pi(M^h)^2 \cos^2\theta^h. \end{aligned}$$

求导后便可得到 θ^h 随外场 H 的变化, 对于易轴在膜面内的情况,

$$K^h \sin[2(\theta^h - \beta)] + M_s^h H \sin\theta^h = 0; \quad (9)$$

对于易轴在膜面外的情况,

$$\begin{aligned} & K^h \sin[2(\theta^h - \beta)] + M_s^h H \sin\theta^h \\ & - 2\pi(M^h)^2 \sin 2\theta^h = 0; \end{aligned} \quad (10)$$

根据 (9) 和 (10) 式便可求出 θ^h 随外场 H 的变化. 该假设 (即在硬磁相厚度较大时, θ^h 服从 SW 模型) 是本文计算的关键, 极大地简化了计算过程. 在文献 [5] 中, 这种简化运算的准确性得到验证, 文献 [7, 8] 运用这种简化运算成功地模拟了 $\beta = 0^\circ$ 时复合磁体的磁矩反转过程.

本文通过联立方程式 (对于易轴在膜面内的情况, 联立 (3), (7) 和 (9) 式, 对于易轴在膜面外的情况, 联立 (5), (8) 和 (10) 式) 求解出三个特殊位置的磁矩偏角, 即硬磁相表面的磁矩偏角 θ^h 、软磁和硬磁界面处的磁矩偏角 θ^0 和软磁表面处的磁矩偏角 θ^s . 继而求出薄膜内部的磁矩偏角的分布, 模拟出磁滞回线和

磁能积等. 本文所选材料 α -Fe 和 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的参数^[5,7]如下: $M_s^s = 1711 \text{ emu/cm}^3$ ($1 \text{ emu/cm}^3 = 10^3 \text{ A/m}$), $M_s^h = 1280 \text{ emu/cm}^3$, $K^s = 4.6 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$ ($1 \text{ erg/cm}^3 = 10^{-1} \text{ J/m}^3$), $K^h = 4.3 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$, $A^s = 2.5 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$, $A^h = 7.7 \times 10^{-7} \text{ erg/cm}$. 本文中运用微磁学三维模拟软件 OOMMF^[39-41] 对双层膜退磁过程进行模拟, 并对三维和一维的模拟结果进行比较. 三维模拟中材料离散单元尺寸为 $6 \text{ nm} \times 6 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$, 其结果与采用更小离散单元尺寸 ($3 \text{ nm} \times 3 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$) 的模拟结果无差别, 说明该网格划分下的计算结果可靠. 阻尼系数 α 的实验值一般为 $0.01-0.1$, 但其值并不影响系统平衡态, 因此模拟中 α 取 0.5 以缩短计算时间, 减少耗能.

3 计算结果与讨论

3.1 微观磁滞回线

为了详细地呈现双层膜中磁矩的反转过程, 本文利用一维微磁学模拟方法计算了易轴在膜面内的双层膜磁矩反转过程中的三个特殊角, 即硬磁相表面的磁矩偏角 θ^h , 软磁相与硬磁相界面处的磁矩偏角 θ^0 和软磁相表面的磁矩偏角 θ^s , 其随外场的变化如图 2 所示. 其中, 为了较明显地展现易轴偏角对磁矩反转过程的影响, 本文选择了一个较大的偏角 (40°) 与 0° 的情况做比较. 从图 2 可以看出, 易轴偏角对磁矩反转过程有较明显的影响. 当外场减小到 -5.5 kOe 时, 磁矩偏角 θ^0 和 θ^s 突变到 23.3° 和 45.7° , 而 θ^h 仍然保持 0° . 随着外场减小, 磁性薄膜中的 θ^0 和 θ^s 不断增大. 当外场减小到 -8.5 kOe 时, θ^0 和 θ^s 增大到 103° 和 142.4° . 外场继续减小时, 磁性薄膜内的磁矩整体跳转到 180° , 完成磁矩反转, 此时外场的相反数被称作钉扎场 H_p . 与 $\beta = 0^\circ$ 不同的是, 当 $\beta = 40^\circ$ 时, 外场为 0 kOe 时, 磁性薄膜内磁矩偏角均为 40° , 即 $\theta^h = \theta^0 = \theta^s = \beta = 40^\circ$. 随着外场的减小, θ^0 和 θ^s 增大, 并且硬磁相表面的磁矩偏角 θ^h 也随着外场的减小而增大, 这与 $\beta = 0^\circ$ 时的 θ^h 相当不同. 当外场降到 -13.9 kOe 时, 特殊位置的磁矩偏角 θ^h , θ^0 和 θ^s 分别增大到 49.1° , 149.1° 和 170.6° . 外场继续减小, 磁性薄膜内部的磁矩发生跳变. 与 $\beta = 0^\circ$ 的情况相比, β 不为零时, 薄膜内的磁矩偏角整体偏大. 在相同的外场下, 磁矩的偏角分布也有很大的

不同. 尤其是硬磁相表面的磁矩偏角, β 不为零时, θ^h 随外场的减小而增大. 钉扎场 H_p 也不同, $\beta = 0^\circ$ 时, 钉扎场为 8.5 kOe , 当 $\beta = 40^\circ$ 时, 钉扎场增加到 13.9 kOe .

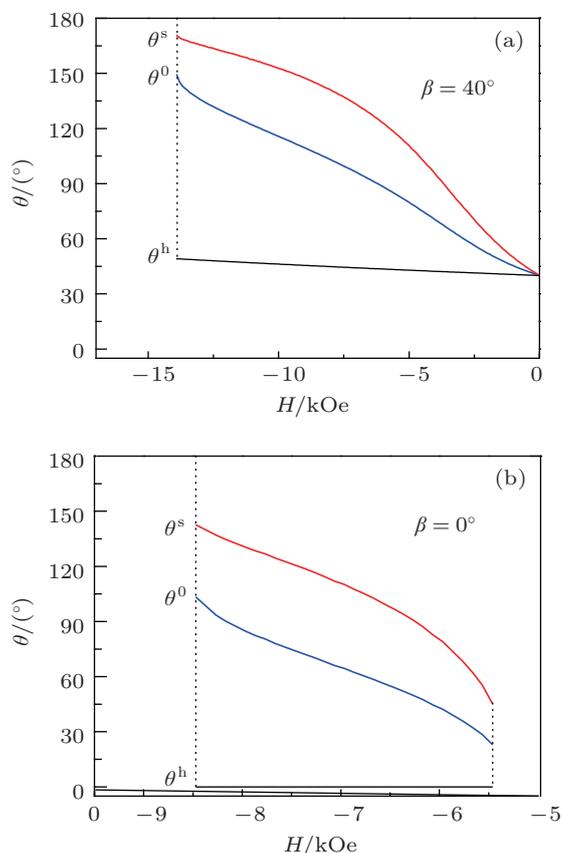


图 2 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的微观磁滞回线 (a) $\beta = 40^\circ$; (b) $\beta = 0^\circ$

3.2 磁滞回线

对薄膜反转过程中磁矩偏角的分析得知, 易轴与外场的夹角 β 对磁矩反转过程的影响较大. 通过计算不同外场下的磁矩偏角分布便可得到薄膜的磁滞回线. 图 3(a) 显示了 $L^h = 10 \text{ nm}$, $L^s = 8 \text{ nm}$ 时, 易轴在膜面内的双层膜在偏角 β 不同的情况下的宏观磁滞回线, 计算得到的相关磁性能在表 1 中列出. 由于本文主要关注磁矩的反转过程, 所以图 3(a) 中只显示了第二象限的磁滞回线. 容易看出, 磁滞回线的方形度随着易轴偏角 β 的增加急剧变差. 外场为零时的宏观磁矩被称作剩磁 M_r , 不同偏角 β 对应的剩磁在表 1 中列出. 当 $\beta = 0^\circ$ 时, 剩磁与饱和磁矩相同, 均为 $1.47 \times 10^3 \text{ emu/cc}$ ($1 \text{ emu/cc} = 10^3 \text{ A/m}$). 在磁矩反转过程中, 在成核之前磁矩方向取向一致. 当外场小于 -5.5 kOe 时, 磁矩开始

出现明显偏转, 从磁滞回线上可以看到明显的成核点. 随着外场的减小, 磁矩偏离原来的方向, 磁矩在 z 轴方向的分量逐渐减小, 宏观表现出磁矩减小. 当外场减小到 -8.5 kOe 时, 薄膜内部的磁矩发生不可逆反转, 宏观磁矩 M 从 0.20×10^3 emu/cc 直接降到 -1.47×10^3 emu/cc, 即达到负饱和状态. 当 $\beta = 10^\circ$ 时, 磁矩随着外场的减小逐渐偏离原来的方向, 磁滞回线上无明显的成核点. 当外场为零时, 剩磁 $M_r = 1.45 \times 10^3$ emu/cc, 与 $\beta = 0^\circ$ 时相比 M_r 降低了 1.5%. 当外场降到 -9.2 kOe 时, 薄膜内部磁矩发生不可逆偏转. 当易轴偏角 β 增加到 20° , 剩磁为 1.38×10^3 emu/cc, 与 $\beta = 10^\circ$ 时相比下降了 6.5%. 当易轴偏角 β 增加到 30° , 剩磁为 1.28×10^3 emu/cc, 与 $\beta = 10^\circ$ 时相比下降了 13.4%. 由此可见, 剩磁 M_r 随着易轴偏角的增加而急剧减小. 当外场为零时, 根据 Brown 的能量方程, 薄膜内部磁矩方向一致, 与磁晶易轴的方向一致. 因此, 剩磁 $M_r = M_s \times \cos \beta$, 随着易轴偏角 β ($0^\circ < \beta < 90^\circ$) 的增加而减小, 其中 M_s 是整个薄膜的平均饱和磁矩.

当宏观的磁矩为零时, 对应外场的相反数是矫顽力 H_c , 表征磁性材料抵抗退磁的能力. 从计算结果可知, 双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的矫顽力随着易轴偏角的增大呈减小的趋势. 仔细分析表 1 中的数据可知, 当 β 较小时, 矫顽力随着 β 的增大而增大, 当 $\beta > 20^\circ$ 时, 矫顽力随着 β 的增大而减小.

表 1 易轴偏角 β 不同时, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的部分磁性能

β		0°	10°	20°	30°	40°	50°
$M_r/10^3 \text{ emu}\cdot\text{cc}^{-1}$	一维	1.47	1.45	1.38	1.28	1.13	0.95
	三维	1.47	1.44	1.37	1.26	1.12	0.94
H_c/kOe	一维	8.5	9.2	9.5	8.9	7.7	6.0
	三维	7.2	6.6	7.6	8.5	7.5	6.0
$(BH)_{\text{max}}/\text{MGOe}$	一维	71.2	49.6	37.5	28.4	19.7	13.1
	三维	62.4	48.1	37.6	28.4	20.3	13.4

此外, 本文还利用三维微磁学模拟程序 OOMMF 计算模拟易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的磁矩反转过程, 如图 3(b) 所示. 计算得到的部分磁性能在表 1 中列出. 从表 1 中可知, 三维模拟得到的剩磁比一维模拟方法得到的稍小, 相差约 1%. 三维模拟得到的矫顽力比一维矫顽力小. 当 $\beta < 30^\circ$ 时, 随着 β 增加,

矫顽力在 7 kOe 附近波动; 当 $\beta > 30^\circ$ 时, 矫顽力随着 β 的增大急剧减小; 当 $\beta = 50^\circ$ 时, 与一维得到的相等, 为 6.0 kOe. 尽管三维和一维模拟所得部分磁性能有所不同, 但是整体变化趋势相差无几, 并且从表 1 可看到, 一维和三维模拟方法得到的最大磁能积相差不大, 且均随着易轴的增大而减小.

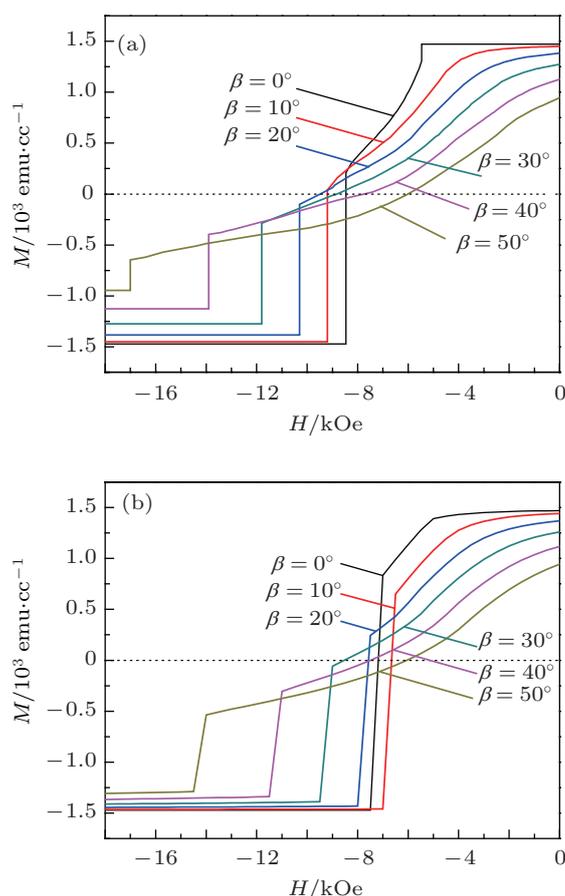


图 3 易轴偏角 β 不同的情况下, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 的宏观磁滞回线 (a) 一维; (b) 三维

图 4 显示了易轴在膜面外的情况下, 偏角 β 不同时一维模拟计算得到的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 的磁滞回线. 从图 4 可以看出, 易轴与外场的偏角对磁矩的退磁过程影响较明显, 不同偏角对应的部分磁性能列于表 2. 当 $\beta = 0^\circ$ 时, 剩磁为 0.92 emu/cc; 易轴偏角 β 增加到 10° 时, 剩磁减小了 5.4%; β 增加到 20° 时, 剩磁为 0.78 emu/cc, 减小了 15%; 剩磁随着易轴偏角 β 的增大单调减小. 随着 β 的增加, 矫顽力整体上呈现减小趋势. 当 β 较小时, 矫顽力随 β 的增大而增大; 当 $\beta > 20^\circ$ 时, 矫顽力随 β 的增大而减小. 剩磁和矫顽力的减小导致最大磁能积随着 β 的增大而减小, 这与易轴在膜面内的

情况类似.

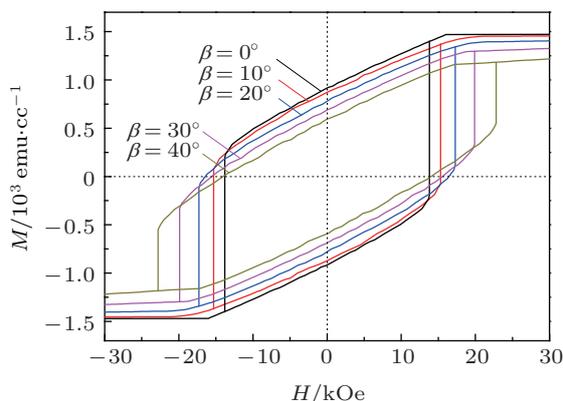


图4 易轴在膜面外的情况下, $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ$ 时双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 的宏观磁滞回线

表2 易轴偏角 β 不同的情况下, 易轴在膜面外时双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的部分磁性能

β	0°	10°	20°	30°	40°
$M_r/10^3 \text{ emu}\cdot\text{cc}^{-1}$	0.92	0.87	0.78	0.69	0.59
H_c/kOe	13.8	15.3	16.4	15.6	13.9
$(BH)_{\text{max}}/\text{MGoe}$	22	20	16.2	12.7	9.4

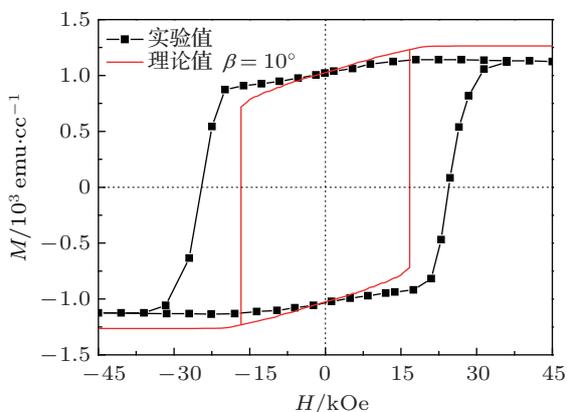


图5 理论计算得到的磁滞回线与实验结果的比较

图5显示了易轴在膜面外的情况下理论计算得到的磁滞回线与实验结果^[28]的比较. 理论计算时易轴偏角 β 取 10° , 是根据文献^[28]图1(d)外场垂直和平行于膜面两种情况下得到的剩磁估算而得, 即 $\tan \beta = \frac{M_{r\parallel}}{M_{r\perp}} \frac{\pi}{2}$, 其中 $M_{r\parallel}$ 和 $M_{r\perp}$ 分别为外场平行和垂直于膜面时的剩磁. 硬磁材料的饱和磁化强度取 $1193 \text{ emu}/\text{cc}$, 是根据单相 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的实验结果, 即文献^[28]图1(a)中的饱和磁化强度得到, 其他的计算参数与本文其他部分计算采用的参数一致. 计算中, 硬磁相和软磁相的厚度分别取 50 和

10 nm , 与实验一致. 由图5可见: 理论计算模拟得到的磁滞回线与实验磁滞回线基本符合, 特别是理论模拟得到的剩磁与实验值一致, 均为 $1.03 \text{ emu}/\text{cc}$. 矫顽力的计算值和实验值相差较大, 理论值矫顽力为 16.7 kOe , 实验值为 24.5 kOe , 实验值比计算值大 50% . 这一较大的差别可能是因为实验中在薄膜界面放置了 5 nm 厚的 Nd 薄膜, 起到了矫顽力的增强效应.

3.3 能量

退磁过程中, 磁矩在交换作用能、外磁场能(塞曼能)、磁晶各向异性和退磁能的作用下达到平衡态. 利用 OOMMF 计算了 $\beta = 0^\circ$ 时易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的退磁曲线及其在退磁过程中的交换作用能 E_{ex} 、磁晶各向异性能 E_{ani} 、外磁场能 E_{H} 、退磁能 E_{dem} 和总能量 E_{tot} , 结果如图6所示. 从图6可看出, 在磁矩退磁过程中, 退磁能 E_{dem} 基本保持在 $1.5 \times 10^{-16} \text{ J}$ 附近, 其中交换作用能、磁晶各向异性能和外磁场能的变化是引起总能量变化的主要因素, 所以本文对退磁能不做细致讨论, 这也说明当一维模拟磁矩在膜面内偏转时忽略退磁能简化运算的合理性. 当外场大于 -5 kOe 时, 薄膜内磁矩方向基本相同, 所以交换作用能最小, 基本为零 ($3 \times 10^{-19} \text{ J}$), 如图6(b)所示. 磁矩方向与易轴的方向保持一致, 所以磁晶各向异性能最小, 几乎为零 ($3 \times 10^{-19} \text{ J}$), 如图6(c)所示. 在 M 保持为正时, 外磁场能随着外场的减小而增大, 如图6(d)所示. 当外场减小到 -5 kOe 时, 薄膜内部的磁矩开始出现明显偏转, 薄膜内部的磁矩偏角出现分布, 交换作用能急剧上升, 同时磁矩偏离易轴方向, 磁晶各向异性能快速增大. 在磁矩出现明显的偏转之后, M 减小, 外磁场能随着外场的减小而缓慢减小. 在 $H = -7 \text{ kOe}$ 时, 薄膜内的磁矩偏角达到最大, 外场继续减小就会导致磁矩的不可逆反转, 完成磁矩反转. 此时, 薄膜的磁晶各向异性能和交换作用能达到最大, 分别为 $2.6 \times 10^{-16} \text{ J}$ 和 $4.0 \times 10^{-16} \text{ J}$. 当 $-5 \text{ kOe} > H > -7 \text{ kOe}$ 时, 尽管外磁场能缓慢减小, 但交换作用能和磁晶各向异性能均随着外场的减小而增大, 所以薄膜内部的总能量仍然随着外场的减小而增大. 当外场为 -7 kOe 时, 总能量增大到 $16.9 \times 10^{-16} \text{ J}$. 由于薄膜内部能量大到一定程度, 磁矩分布不稳定, 故而磁矩发生不可逆反转, 致使薄膜内部磁矩达到另一个一致状

态, $\theta = 180^\circ$, 交换作用能和磁晶各向异性能均减小至最小, 外磁场能急剧减小, 导致总能量突降到 $-16.3 \times 10^{-16} \text{ J}$. 随着外场的减小, 薄膜内部磁矩方向不发生改变, 保持一致, 交换作用能和磁晶各向异性能保持不变, 外磁场能继续减小, 导致总能量随着外场的减小而减小.

我们还计算了 $\beta = 30^\circ$ 时易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的磁滞回线及在退磁过程中的各项能量, 结果如图 7 所示. 图 7(a) 显示了磁滞回线, 与 $\beta = 0^\circ$ 时不同的是, 即使外场很大时磁矩也随着外场的减小逐渐偏离 y 轴方向, 图 7(b) 和 (c) 中的交换作用能和磁晶各向异性能随着外场的变化更明显地说明了这一点. 当

$H = 20 \text{ kOe}$ 时, 交换作用能和磁晶各向异性能分别为 $0.23 \times 10^{-16} \text{ J}$ 和 $0.9 \times 10^{-16} \text{ J}$, 随着外场的降低磁晶各向异性场逐渐占主导作用, 磁矩逐渐趋于一致, 偏离 y 轴并向磁晶易轴靠近, 所以磁晶各向异性能和交换作用能均降低. 当外场降低到 10 kOe 时, 磁晶各向异性能降低到 $0.4 \times 10^{-16} \text{ J}$, 交换作用能降低到 $0.2 \times 10^{-16} \text{ J}$. 当外场降低到零时, 薄膜内磁矩基本保持一致, 并且与易轴方向相同, 所以此时交换作用能和磁晶各向异性能最小, 分别为 $0.05 \times 10^{-16} \text{ J}$ 和 $0.04 \times 10^{-16} \text{ J}$, 外磁场能为零. 外场继续降低, 薄膜内磁矩方向受到外场的影响偏离易轴, 磁矩偏角出现分布, 磁晶各向异性能和交换作用能快速增大. 当外场减小到 -9 kOe 时, 薄膜内

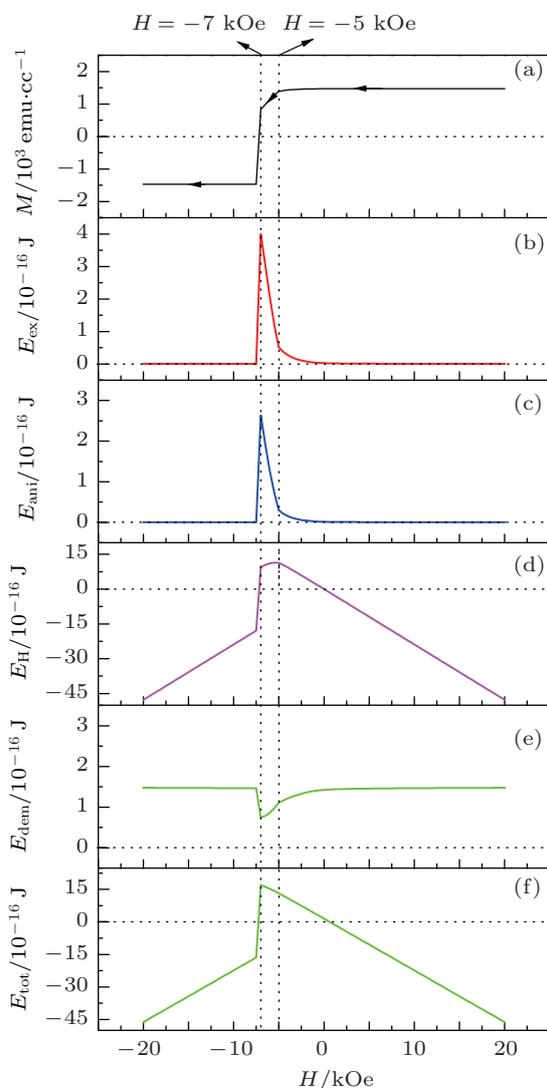


图 6 $\beta = 0^\circ$ 时, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的退磁曲线和退磁过程中的各项能量的变化曲线 (a) 退磁曲线; (b) 交换作用能; (c) 磁晶各向异性能; (d) 外磁场能; (e) 退磁能; (f) 总能量

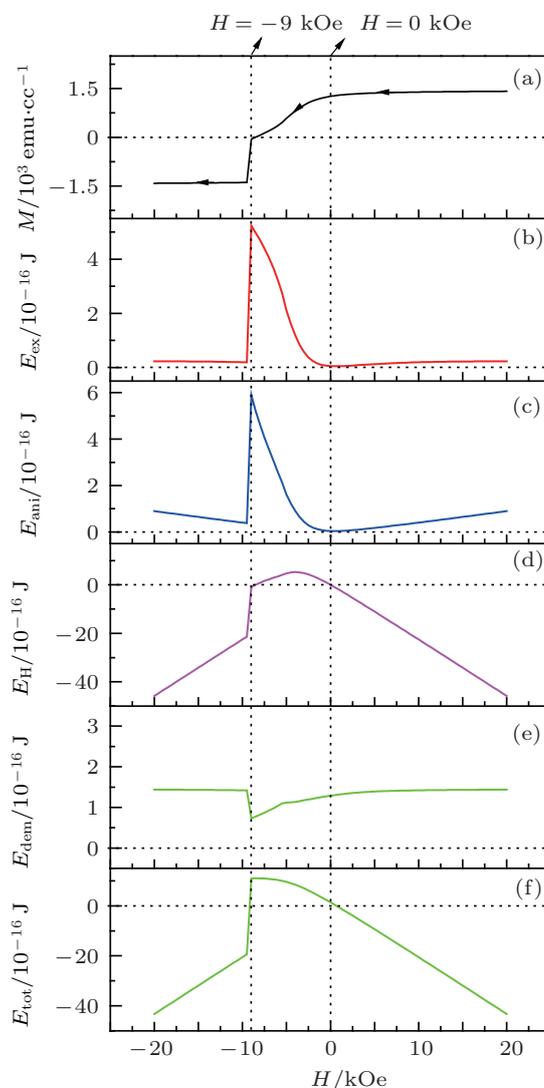


图 7 $\beta = 30^\circ$ 时, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的磁滞回线和退磁过程中各项能量的变化曲线 (a) 磁滞回线; (b) 交换作用能; (c) 磁晶各向异性能; (d) 外磁场能; (e) 退磁能; (f) 总能量

磁矩最大程度地偏离易轴, 交换作用能和磁晶各向异性能达到最大, 分别为 5.23×10^{-16} J 和 5.89×10^{-16} J, 同时总能量达到最大 (11×10^{-16} J). 外场继续降低, 磁矩发生不可逆反转, 交换作用能、磁晶各向异性能和外磁场能均发生突降, 导致总能量突降到 -19.39×10^{-16} J. 外场继续减小, 薄膜内部磁矩基本一致, 交换作用能基本保持不变, 外场能降低. 发生不可逆反转之后, 磁矩并未达到负饱和状态, 随着外场的减小, 磁矩逐渐靠近 $-y$ 轴方向, 因此磁晶各向异性能逐渐增大.

结合图 6 和图 7 可以看出, 易轴偏角 β 影响磁矩反转过程中各项能量, 总能量最大时对应的各项能量如图 8 所示. 从图 8 可看出, 总能量最大时对应的退磁能基本保持不变, 外磁场能均随易轴偏角增大而减小, 交换作用能先增大后减小但是幅度不大, 磁晶各向异性能则随着易轴偏角的增大而增大. 由于易轴偏角的影响, 在外场很大时磁矩就已经开始随着外场的降低而偏离 y 轴方向, 即磁矩在 y 轴方向的分量逐渐降低, 而外磁场能与磁矩在 y 轴分量的大小有关. 所以, 总能量最大时对应的外磁场能随着易轴偏角的增大而减小. 磁矩受到磁晶各向异性场的牵制, 与易轴无偏角 ($\beta = 0^\circ$) 时相比, 磁矩更不容易发生不可逆反转, 磁晶各向异性能在磁矩偏转过程中不断积累, 所以总能量最大时的磁晶各向异性能随着易轴偏角的增大而增大. 另外, 从图 8 可看出, 总能量随着易轴偏角的增大而减小主要是由外磁场能的急剧减小所致.

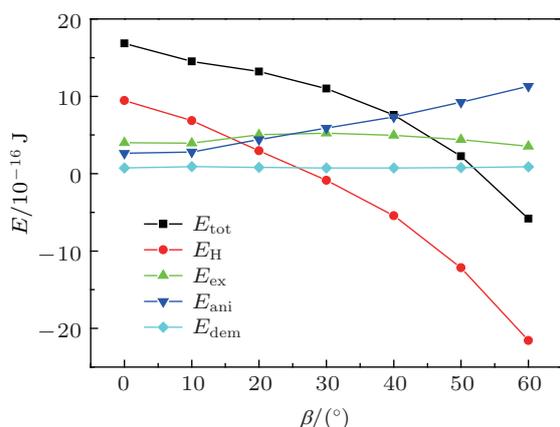


图 8 退磁过程中总能量最大时对应的各项能量随易轴偏角的变化

3.4 磁能积

磁能积是磁性材料非常重要的一个特性, 能

衡量磁性材料存储信息密度. 磁能积可根据退磁曲线计算, 一个外场 H 值对应一个 M 值, 利用 $BH = -H(4\pi M + H)$ 可以计算得到磁能积 BH . 图 9 是易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 不同偏角 β 对应的磁能积. 当易轴偏角存在或者不存在时, 磁能积的变化均是随着外场的下降先增大后减小, 出现磁能积的最大值, 即最大磁能积 $(BH)_{\text{max}}$. 在一维模拟结果中, 当 $\beta = 0^\circ$ 时, 磁能积随着外场的减小而增大, 当外场减小到 -5.5 kOe 时, 磁能积达到最大值, 即最大磁能积 $(BH)_{\text{max}} = 71.2 \text{ MGOe}$. 随后, 磁能积则随着外场的减小而减小. 当易轴偏角为 10° 时, 最大磁能积为 49.6 MGOe , 与 $\beta = 0^\circ$ 时相比 $(BH)_{\text{max}}$ 下降了 30.3% . 这是由于易轴与外场存在偏角, 剩磁降低, 磁滞回线的方形度下降, 导致磁能积降低. 当 β 增大到 30° 时, 最大磁能积 $(BH)_{\text{max}}$ 为 28.4 MGOe . 当 $\beta = 50^\circ$ 时, 最大磁能积 $(BH)_{\text{max}}$ 仅为 13.1 MGOe , 与 $\beta = 0^\circ$ 时的最大磁能积相比, 下降了 81.6% . 由此可见, 易轴偏角极大地削弱了薄膜在退磁过程中的最大磁能积. 在实际材料中, 磁晶易轴取向并非

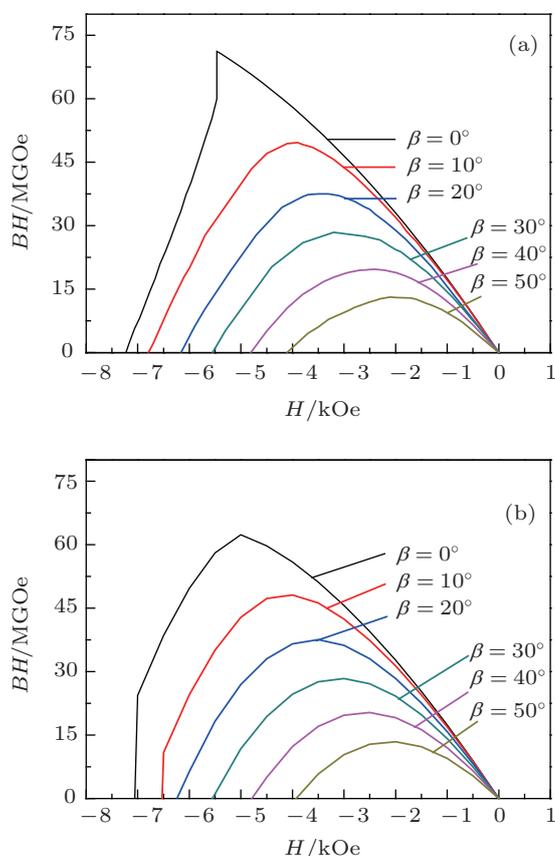


图 9 当易轴偏角 β 不同时, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10 \text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8 \text{ nm})$ 的磁能积 (a) 一维; (b) 三维

绝对一致, 本文的计算分析在一定程度上解释了实验中的最大磁能积小于理论值的原因. 利用三维模拟程序软件 OOMMF 计算了双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (10 nm)/ $\alpha\text{-Fe}$ (8 nm) 的磁能积, 结果如图 9(b) 所示. 从图 9 可以看出, 两种方法得到的结果基本一致. 磁能积随着外场的减小先增大后减小, 其间出现最大磁能积 $(BH)_{\max}$, 并且最大磁能积随着偏角的增大而减小.

$L^s = 5, 10$ nm 时, 双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (10 nm)/ $\alpha\text{-Fe}$ (L^s) 的最大磁能积同样可利用三维和一维模拟方法计算得到, 结果如表 3 所列. $L^s = 5, 8, 10$ nm 时双层膜的最大磁能积均随着易轴偏角的增加而减小, 但不同软磁相厚度的双层膜的磁能积随易轴偏角变化的快慢也有所不同. 在一维模拟中, 在 $L^s = 5$ nm 的情况下, 当易轴偏角增加到 10° 时, 最大磁能积降到 62.5 MGOe, 与 $\beta = 0^\circ$ 相比 $(BH)_{\max}$ 下降了 21.8%. 易轴偏角继续增大到 30° 时, $(BH)_{\max} = 35.4$ MGOe, 与 $\beta = 0^\circ$ 时相比 $(BH)_{\max}$ 下降了 55.7%. 对于 $L^s = 8$ nm, 相同的易轴变化带来的磁能积变化更大, $\beta = 10^\circ$ 时, 最大磁能积下降了 30.3%, β 增加到 30° 时, 最大磁能积下降了 60.1%. 在 $L^s = 10$ nm 的情况下, 易轴偏角增大到 30° 时, 最大磁能积下降了 61.6%. 由此可知, 软磁相厚度越大, 磁能积相对下降得越快, 即软磁相厚度越大, 磁能积受易轴偏角的影响越大. 此外, 在相同的易轴偏角下, 软磁相厚度越小, 最大磁能积越大, 这是由软磁材料的低矫顽力所致. 仔细比较表 3 可以发现, 当 $L^s = 5$ nm 时, $\beta = 0^\circ$ 的最大磁能积为 80 MGOe, 比 $L^s = 8$ nm 时对应的最大磁能积 (71.2 MGOe) 高出 8.8 MGOe. 随着易轴偏角的增大, $L^s = 5$ nm 时的优势趋于变弱, 当易轴偏角为 30° 时, $L^s = 5$ nm 时的最大磁能积比 $L^s = 8$ nm 时的最大磁能积高出 7 MGOe. 当 $\beta = 60^\circ$ 时, 两者仅相差 3.1 MGOe. 随着易轴偏角的增加, 不同软磁相厚度的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (10 nm)/ $\alpha\text{-Fe}$ (L^s) 对应的最大磁能积逐渐减小, 最终趋于相同. 当 $\beta = 60^\circ$ 时, $L^s = 5, 8$ 和 10 nm 对应的最大磁能积分别为 10.7, 7.6 和 5.9 MGOe, 三者非常接近.

从表 3 还可看出, 在 β 较小时, 一维模拟得到的最大磁能积稍大, β 增大到一定程度时, 三维模拟得到的结果偏大, 但是两者相差较小. 在 $L^s = 5$ nm 的情况下, $\beta = 10^\circ$ 时最大磁能积下降了 16%, $\beta = 30^\circ$ 时最大磁能积下降了 43.4%. 在 $L^s = 10$ nm 的情况

下, $\beta = 10^\circ$ 时最大磁能积下降了 21.8%, $\beta = 30^\circ$ 时最大磁能积下降了 54.5%. 软磁相厚度越大时, 双层膜的磁能积受易轴偏角的影响越大, 与一维得到的结果一致. 这进一步验证了一维模拟的可信度, 既可以节省计算资源又保证了结果的准确性.

表 3 $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ 时, 易轴在膜面内的双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (10 nm)/ $\alpha\text{-Fe}$ (L^s) 的最大磁能积 $(BH)_{\max}$ /MGOe

β		0°	10°	30°	60°
$L^s = 5$ nm	一维	80	62.5	35.4	10.7
	三维	76.9	64.6	39.1	10.9
$L^s = 8$ nm	一维	71.2	49.6	28.4	7.6
	三维	62.4	48.1	28.4	7.8
$L^s = 10$ nm	一维	57.1	40.8	21.9	5.9
	三维	49.6	38.8	22.9	6.2

4 结论

本文运用一维和三维微磁学模拟方法, 研究了考虑易轴与外场存在偏角 β 的情况下磁性双层膜 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ 中磁矩的反转过程, 着重分析了磁矩反转过程中的磁滞回线、能量和磁能积, 并与实验结果进行了对比. 计算结果表明, 易轴偏角 β 对磁矩反转过程影响较大. 当 $\beta \neq 0^\circ$ 时, 在磁矩反转过程中无明显成核现象, 磁矩随着外场的减小逐渐偏离原来的方向, 直到外场降到钉扎场时, 磁矩发生不可逆反转. 随着易轴偏角 β 的增大, 剩磁减小, 磁滞回线方形度变差, 磁矩反转过程中的最大磁能积急剧减小. 当 $\beta = 0^\circ$ 时, 交换作用能和磁晶各向异性在成核之前保持最小, 在成核之后随着磁矩的偏转增大, 磁矩发生不可逆反转时, 又急剧减小到最小. 外磁场能随着磁矩的偏转先增大后减小, 在磁矩发生不可逆反转时急剧减小, 而后随着外场的减小而减小. 当 $\beta \neq 0^\circ$ 时, 在磁矩反转过程中, 由于磁晶各向异性场与外场不在同一方向, 导致交换作用能和磁晶各向异性随着磁矩的偏转先减小后增大, 在外场为零时出现最小, 当磁矩发生不可逆反转时急剧减小. 外磁场能的变化与 $\beta = 0^\circ$ 时相同, 随着磁矩的偏转先增大后减小, 在磁矩发生不可逆反转时急剧减小, 而后随着外场的减小而减小. 在磁矩反转过程中, 总能量最大时对应的外磁场能随易轴偏角增大而减小, 交换作用能基本保持不变, 而磁晶各向异性随着易轴偏角的增大而减小. 软磁相厚度不同, 易轴偏角对磁能积的影响程度略有

不同. 在不同软磁相厚度的情况下, 最大磁能积随易轴偏角变化的分析表明, 软磁相厚度越大, 最大磁能积下降得相对越快, 即软磁相厚度越大, 最大

磁能积受易轴偏角的影响越大. 在膜面外的易轴偏角的影响也类似, 理论计算和实验结果符合较好.

- [1] Kneller E F, Hawig R 1991 *IEEE Trans. Magn.* **27** 3588
- [2] Skomski R, Coey J M D 1993 *Phys. Rev. B* **48** 15812
- [3] Schrefl T, Kronmüller H, Fidler J 1993 *J. Magn. Magn. Mater.* **127** L273
- [4] Asti G, Ghidini M, Pellicelli R, Pernechele C, Solzi M, Albertini F, Casoli F, Fabbri S, Pareti L 2006 *Phys. Rev. B* **73** 094406
- [5] Zhao G P, Deng Y, Zhang H W, Chen L, Feng Y P, Bo N 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 093928
- [6] Belemuk A M, Chui S T 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 093909
- [7] Zhao G P, Wang X L 2006 *Phys. Rev. B* **74** 012409
- [8] Zhao G P, Zhou G, Zhang H W, Feng Y P, Xian C W, Zhang Q X 2008 *Comput. Mater. Sci.* **44** 117
- [9] Schrefl T, Fidler J, Kronmüller H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 6100
- [10] Shindo M, Ishizone M, Sakuma A, Kato H, Miyazaki T 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 4444
- [11] Chumakov D, Schäfer R, Elefant D, Eckert D, Schultz L, Yan S S, Barnard J A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 134409
- [12] Guo Z J, Jiang J S, Pearson J E, Bader S D, Liu J P 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 2029
- [13] Jiang J S, Pearson J E, Liu Z Y, Kabius B, Trasobares S, Miller D J, Bader S D, Lee D R, Haskel D, Srajer G, Liu J P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5293
- [14] Pogossian S P, Spenato D, Dekadjevi D T, Youssef J B 2006 *Phys. Rev. B* **73** 174414
- [15] Ma B, Wang H, Zhao H B, Sun C G, Acharya R, Wang J P 2010 *IEEE Magn. Lett.* **46** 2345
- [16] Hou H C, Liao J W, Lin M S, Lin H J, Chang F H, Chen R Z, Chiu C H, Lai C H 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 07C104
- [17] Liu S, Higgins A, Shin E, Bauser S, Chen C, Lee D, Shen Y, He Y, Huang M Q 2006 *IEEE Trans. Magn.* **42** 2912
- [18] Neu V, Häfner K, Patra A K, Schultz L 2006 *J. Phys. D* **39** 5116
- [19] Patra A K, Neu V, Fahler S, Groetzschel R, Schultz L 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 142512
- [20] Serrona L K E B, Sugimura A, Adachi N, Okuda T, Ohsato H, Sakamoto I, Nakanishi A, Motokawa M, Ping D H, Hono K 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1751
- [21] Ping D H, Hono K, Hirotsawa S 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 7769
- [22] Wang Y, Wang R, Xie H L, Bai J M, Wei F L 2013 *Chin. Phys. B* **22** 68506
- [23] Li Z B, Shen B G, Niu E, Sun J R 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 062405
- [24] Yan S S, Elkawni M, Li D S, Garmestani H, Liu J P, Weston J L, Zangari G 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 4535
- [25] Deng Y, Zhao G P, Bo N 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 037502 (in Chinese) [邓娅, 赵国平, 薄鸟 2011 物理学报 **60** 037502]
- [26] Liu J P, Liu Y, Skomski R, Sellmyer D J 1999 *IEEE Trans. Magn.* **35** 3241
- [27] Liu W, Zhang Z D, Liu J P, Chen L J, He L L, Liu Y, Sun X K, Sellmyer D J 2002 *Adv. Mater.* **14** 1832
- [28] Cui W B, Takahashi Y K, Hono K 2012 *Adv. Mater.* **24** 6530
- [29] Zhang J, Takahashi Y K, Gopalan R, Hono K 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 122509
- [30] Liu Y, George T A, Skomski R, Sellmyer D J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 172504
- [31] Asti G, Solzi M, Ghidini M 2001 *J. Magn. Magn. Mater.* **226–230** 1464
- [32] Zhao G P, Deng Y, Zhang H W, Cheng Z H, Ding J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 07D340
- [33] Asti G, Solzi M, Ghidini M, Neri F M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 174401
- [34] Leineweber T, Kronmüller H 1997 *J. Magn. Magn. Mater.* **176** 145
- [35] Pellicelli R, Solzi M, Neu V, Hägner K, Pernechele C, Ghidini M 2010 *Phys. Rev. B* **81** 184430
- [36] Wilson M J, Zhu M, Myers R C, Awschalom D D, Schiffer P, Samarth N 2010 *Phys. Rev. B* **81** 045319
- [37] Zhao G P, Chen L, Huang C W, Guo N L, Feng Y P 2010 *Solid State Commun.* **150** 1486
- [38] Brown W F 1945 *Rev. Mod. Phys.* **17** 15
- [39] Donahue M J, Porter D G 1999 *OOMMF User's Guide version 1.0* (Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology) NISTIR 6376
- [40] Song S Y, Guo G H, Zhang G F, Song W B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5757 (in Chinese) [宋三元, 郭光华, 张光富, 宋文斌 2009 物理学报 **58** 5757]
- [41] Chen R J, Rong C B, Zhang H W, He S L, Zhang S Y, Shen B G 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 4341 (in Chinese) [陈仁杰, 荣传兵, 张宏伟, 贺淑莉, 张绍英, 沈保根 2004 物理学报 **53** 4341]

Micromagnetic analysis of the effect of the easy axis orientation on demagnetization process in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ bilayers*

Xia Jing Zhang Xi-Chao Zhao Guo-Ping[†]

(College of Physics and Electronic Engineering, Sichuan Normal University, Chengdu 610068, China)

(Received 21 July 2013; revised manuscript received 19 August 2013)

Abstract

The hysteresis loops and energy products in the magnetization reversal process are investigated by one- and three-dimensional micromagnetic methods for a $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ bilayer system with an angle β between the applied field and the easy axis, and the results are compared with available experimental results. The calculation shows that the deviation of the easy axis affects the magnetization reversal process seriously. When $\beta \neq 0^\circ$, there is no obvious nucleation in the magnetization reversal process. The remanence decreases as β decreases, and the squareness of the hysteresis loops is weakened, leading to the sharp decrease of energy product. For $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}(10\text{ nm})/\alpha\text{-Fe}(8\text{ nm})$, the energy product decreases by 30.3% when $\beta = 10^\circ$. In the magnetization reversal process, as the total energy reaches the maximum, Zeeman energy decreases with increasing of β , and the exchange energy first increases and then decreases slightly, and the anisotropic energy increases with the increasing of β . The deviation of easy axis has a greater influence on the energy product of the bilayer system with larger soft thickness. The out-of-plane deviation of easy axis has a similar effect.

Keywords: micromagnetic simulation, easy axes, energy products, energy

PACS: 75.78.Cd, 75.30.Gw, 75.70.-i

DOI: 10.7498/aps.62.227502

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074179) and the Construction Plan for Scientific Research Innovation Teams of Institution of Higher Education of Sichuan Province, China (Grant No. 12TD008).

[†] Corresponding author. E-mail: zhaogp@uestc.edu.cn