
***Contributions to modeling
and simulation of physical
processes with hysteresis***

HABILITATION THESIS

Dr. Laurențiu STOLERIU

Iași - 2014

Contents

Summary.....	1
Rezumat	3
Section I – Scientific and professional results	5
1 Introduction	5
2 Micromagnetic models	6
2.1 General remarks on micromagnetic modeling.....	6
2.2 Micromagnetic analysis of switching and domain structure in amorphous metallic nanowires	8
2.3 Angular dependent resonant absorption curves in 2D magnetic nanowires arrays	15
2.4 Micromagnetic analysis of magnetic switching in nanostructures for patterned media, MRAM and other applications.....	18
2.5 Micromagnetic model for magnetization processes in rare earth – transition metal amorphous alloys	22
2.6 Micromagnetic analysis of magnetic noise in advanced particulate recording media.....	25
2.7 Conclusions	32
3 Phenomenological models of hysteresis.....	34
3.1 General remarks on scalar and vector phenomenological hysteresis models.....	34
3.2 Micromagnetic investigation of the physical basis of the Preisach-type models parameters	39
3.3 A new Preisach model for strongly correlated particulate media (PM2 model)	44
3.4 A new vector model designed for parallel computing	53
3.5 Realistic reversible magnetization component in scalar Preisach-type models.	59
3.6 Conclusions	66
4 Understanding and using the first-order reversal curves (FORC) diagram method.....	68
4.1 General remarks on FORC experimental method	68
4.2 Micromagnetic and Preisach analysis of the first-order reversal curves diagram	70
4.3 Magnetization reversible and irreversible components evaluation using First and Second-order magnetization curves.....	74
4.4 Using an experimental FORC distribution as input for a Preisach-type models.....	83
4.5 Two new types of FORC diagrams for identification procedures in vector models of hysteresis.....	87
4.6 Using FORC diagram method in ferroelectric hysteresis.....	95
4.7 Conclusions	106
5 Modeling multiple hysteresis in spin crossover compounds.....	108
5.1 General remarks on spin crossover compounds	108
5.2 The mechano-elastic model.....	109
5.3 Conclusions	114
Section II – Perspectives. Plan for career development	115
Section III – References.....	119

Summary

The present habilitation thesis includes some of the most important scientific results published by the author since obtaining the doctor in science title. The common ground that defines these results is the study of systems with hysteresis. While the main part of this work is constructed around micromagnetic studies of ferromagnetic hysteresis, there is also a section devoted to translating knowledge from ferromagnetic to ferroelectric hysteresis as well as a separate chapter that describes an original model for a different type of hysteresis – the temperature and pressure hysteresis in spin crossover systems.

The thesis is divided in three sections, from which the first one is presenting, in four chapters, scientific results of the author.

After an introduction that outlines some of the main concepts used in the text – like physical or phenomenological model – the first chapter consists of contributions to understanding some of the most intimate mechanisms involved in magnetization processes, those taking place at nanometric to micrometric level. After a short overview of the most important micromagnetic models we present how these models can help understanding magnetization structures formation in amorphous wires as function of size and magnetic properties of the alloy, how the magnetic domain structures can influence resonant absorption in Permalloy wires arrays or what impact it has on magnetic switching of triangular and elliptical nanoislands. All of these studies became possible only recently, when regular computers became strong enough to solve large finite element problems, and even now we still had to use several workstations in a parallel computing environment to approach them. Nevertheless, in some cases, simpler models that require smaller computing power were able to cope with careful chosen problems and this chapter ends with two examples of results obtained using a macrospin micromagnetic model in explaining the role of atomic clusters in rare earth – transition metal magnetic alloys and some characteristics of the noise in magnetic recording.

The second chapter makes use of the same, rather simple micromagnetic model to explain the limits of the approximations considered in a class of phenomenological models – the Preisach-type models – that were designed for significantly larger scale problems. First, we show that the physical mechanisms that lead to the formulation of a feedback Preisach model – i.e., moving model which considers that the interaction field distribution of a macroscopic particulate sample changes linearly with the total moment of the sample – are related to the geometrical characteristics of the samples. Moreover, the results indicate that the linear dependence is only a first-order approximation that is not valid for strongly interacting systems and we propose a more general new model – the PM2 model – which is numerically more efficient and includes previous models as particular cases. The discussion is extended to vector models and the relation between the vector character of samples' magnetic moment and the reversible magnetization component as defined in scalar hysteresis. Here we introduce a versatile vector model designed to efficiently run on parallel computing environments and we generalize the PM2 model adding a reversible component with physical significance.

The third chapter applies methods and results presented in the first two chapters to a recently introduced experimental method – the first-order reversal curves (FORC) diagram. The method was firstly introduced by Mayergoyz as a parameter identification tool for the classical Preisach model but, recently, Pike presented a numerical algorithm that allowed its generalization to any system with hysteresis. First we present how some of our previous results on the relation between geometry and interaction field distribution correlate with FORC diagrams features,

especially with the negative region that cannot be explained with a classic approach. Then, we introduce a similar diagram based on second order reversal curves and we show how it can help in discerning between irreversible and reversible components of magnetization using this opportunity to check how the PM2 model compares to other models in describing experimentally observed features of FORC diagrams. As we have shown in the previous chapter, there is an intimate relation between scalar reversible magnetization component and its vector behavior and, thus, we analyze how FORC diagram can integrate into phenomenological vector modeling. Here we propose two new diagrams: a 3D FORC diagram and a rotational FORC diagram and we show how they can help studying different aspects of vector modeling. The chapter ends with an example of how knowledge in ferromagnetic hysteresis can be applied to ferroelectric hysteresis, presenting a FORC study of polarization processes in ceramics.

The last chapter includes results on modelling a different kind of hysteresis – the thermal and pressure hysteresis in spin crossover compounds – using a new mechano-elastic model. We show that the model we have proposed is able to describe many observed behavior as static and dynamic thermal effects and external pressure influence.

The second section discusses research perspectives with emphasis on what high performance (parallel) computing can bring to hysteresis modeling in both ferromagnetic and spin crossover materials.

The last section includes the references cited throughout this work.

Rezumat

Prezenta teză de abilitare include unele dintre cele mai importante rezultate științifice publicate de autor de la obținerea titlului de doctor în științe. Toate aceste rezultate au ca aspect comun studiul sistemelor cu histerezis. Cea mai mare parte a lucrării de față este construită în jurul studiului micromagnetic a histerezisului feromagnetic dar există și o porțiune consacrată prezentării felului în care cunoștințele obținute din studiul histerezisului feromagnetic se pot reflecta în studiul histerezisului feroelectric și, de asemenea, un capitol care descrie un model original pentru un alt fel de histerezis – cel în funcție de temperatură și de presiune prezent în sisteme cu tranziție de spin.

Teza este împărțită în trei secțiuni, dintre care prima prezintă, de-a lungul a patru capitole, rezultate științifice ale autorului.

După o introducere care creionează unele dintre principalele concepte utilizate mai departe în text – precum model fizic sau model fenomenologic – primul capitol constă în contribuții direcționate spre înțelegerea unora dintre cele mai intime mecanisme implicate în procesele de magnetizare, cele care au loc la nivel nanometric. După o scurtă vedere de ansamblu a celor mai importante modele micromagnetice prezentăm cum aceste modele pot ajuta la înțelegerea structurilor de domenii magnetice din fire metalice amorfe în funcție de mărimea lor și de proprietățile magnetice ale aliajului, cum structura de domenii poate influența absorbția rezonantă în rețele de fire din permalloy sau ce impact are aceasta asupra comutării în nanoinsule triunghiulare sau eliptice. Toate aceste studii au devenit posibile relativ recent, când calculatoarele obișnuite au devenit suficient de puternice pentru a rezolva probleme de element finit de mari dimensiuni, și chiar și acum a trebuit să folosim mai multe stații de lucru în paralel pentru a aborda aceste probleme. Cu toate acestea, în unele cazuri, modele mai simple ce solicitau putere de calcul redusă au fost capabile să descrie unele probleme iar acest capitol se încheie cu două exemple de rezultate obținute cu un model micromagnetic cu macrospini în explicarea rolului clusterilor atomici asupra proprietăților aliajelor magnetice de pământ rar cu metal de tranziție și unele caracteristici ale zgomotului în înregistrările magnetice.

În al doilea capitol se folosește același model micromagnetic mai simplu pentru a explica limitele unora dintre aproximațiile luate în considerare într-o clasă de modele fenomenologice – modelele de tip Preisach – care au fost proiectate pentru sisteme cu dimensiuni la o scară semnificativ mai mare. Pentru început arătăm că mecanismul ce a dus la formularea unui model Preisach cu feedback – modelul moving în care se consideră că distribuția interacțiunilor într-o probă macroscopică se modifică liniar cu momentul total al probei – este în relație cu geometria probei. Mai mult, rezultatele indică faptul că dependența liniară este numai o aproximație de prim ordin care nu mai este adevărată în cazul sistemelor cu interacțiuni puternice și aici propunem un nou model – modelul PM2 – mai eficient din punctul de vedere al calculelor necesare și care include modele existente drept cazuri particulare. Discuția este apoi extinsă la modele vectoriale și la relația dintre caracterul vectorial al momentului magnetic și componenta reversibilă a magnetizării așa cum este definită în histerezisul scalar. Aici introducem un nou model vectorial proiectat să ruleze eficient în medii de calcul paralel și generalizăm modelul PM2 adăugând o componentă reversibilă descrisă pornind de la un suport fizic.

Al treilea capitol aplică metode și rezultate prezentate în primele două capitole unei metode experimentale introdusă recent – metoda diagramelor curbilor de întoarcere de prim ordin (FORC). Această metodă a fost introdusă de Mayergoyz pentru identificarea parametrilor modelului Preisach clasic iar, recent, Pike a prezentat un algoritm ce permite generalizarea

metodei la orice sistem cu histerezis. Pentru început prezentăm felul în care rezultate prezentate în capitolele anterioare se corelează cu aspecte observate în diagramele FORC, în special cu regiunile negative ce nu pot fi explicate în modelul clasic. Apoi introducem o diagramă similară pornind de la curbe de magnetizare de ordinul al II-lea și demonstrăm cum aceasta poate fi folosită în a discerne componentele reversibilă și ireversibilă ale magnetizării, folosind această oportunitate și pentru a verifica felul în care modelul PM2 descrie diagrame FORC experimentale, în comparație cu alte modele. După cum am arătat anterior, există o relație intimă între componenta reversibilă scalară a magnetizării și comportarea vectorului magnetizație; în acest capitol extindem această discuție la felul în care diagrama FORC se integrează în modelele fenomenologice vectoriale. Astfel, propunem două noi diagrame: o diagramă FORC 3D și o diagramă FORC rotațională și arătăm cum acestea pot ajuta studiului diferitelor aspecte ale modelelor vectoriale. Capitolul se încheie cu un exemplu al felului în care cunoștințe dobândite în studiul histerezisului feromagnetic pot fi aplicate în histerezisul feroelectric prezentând un studiu FORC al procesului de polarizare în materiale ceramice.

Ultimul capitol include concluzii în studiul unui alt tip de histerezis – cel determinat de temperatură și de presiune în compuși cu tranziție de spin – cu ajutorul unui nou model mecano-elastic. Demonstrăm cum modelul propus de noi este capabil să descrie multe dintre comportările observate precum efecte termice statice și dinamice sau influența presiunii externe.

Cea de a doua secțiune aduce în discuție perspective de profesionale de cercetare cu accent pe contribuția potențială a calculului de înaltă performanță (paralel) în modelarea histerezisului în materiale feromagnetice și cu tranziții de spin.

Ultima secțiune include referințe citate de-a lungul tezei.