

Магнитная структура границы ферро- и антиферромагнетика. II. Скомпенсированная граница

А. Г. Гречнев

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4
E-mail: grechnev@ilt.kharkov.ua

А. С. Ковалев

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 11 февраля 1998 г.

В рамках классической дискретной модели рассмотрена скомпенсированная граница раздела ферро- и антиферромагнетика. Построена фазовая диаграмма возможных коллинеарных и неколлинеарных магнитных конфигураций границы и исследован характер трансформации намагниченности при переходе из коллинеарной конфигурации в неколлинеарную.

У межах класичної дискретної моделі розглянуто скомпенсовану межу поділу феро- та антиферомагнетиків. Побудовано фазову діаграму можливих колінеарних та неколінеарних магнітних конфігурацій межі і спостережено характер трансформації намагніченості при переході із колінеарної конфігурації у неколінеарну.

PACS: 75.10.Nk, 75.40.Mg, 75.70.Cn

Проблема сосуществования ферромагнитной (ФМ) и антиферромагнитной (АФМ) фаз возникла при изучении микрочастиц кобальта с окисленной (CoO) поверхностью. Мейклджен и Бин [1] открыли для этой системы явление сдвига петли гистерезиса (exchange bias). Примерно в то же время началось изучение неупорядоченных сплавов типа Co/CoO, содержащих вкрапления АФМ зерен в ФМ матрице [2]. Открытие явления гигантского магнитосопротивления положило начало бурным теоретическим и экспериментальным исследованиям многослойных магнитных систем с чередующимися ФМ и АФМ слоями (Fe/Cr, Co/CoO и др.) [3]. При теоретическом описании магнитных свойств границы раздела используют, как правило, классические модели магнетиков в обменном приближении. Так, в работах [4] и [5] описано явление сдвига петли гистерезиса в рамках микромагнитного подхода. В работе [6] изучен ФМ резонанс в двухслойных ФМ/ФМ и ФМ/АФМ системах и, в частности,

в системе Co/CoO. В этих статьях рассмотрены слои конечной толщины (несколько межатомных расстояний); структура границ и частоты спиновых волн в существенной мере определяются этой толщиной.

В настоящей работе и в работе [7] предложены простые теоретические модели границы раздела полубесконечных легкоосных ФМ/АФМ, позволяющие аналитически рассмотреть задачу о магнитной структуре границы и существовании локализованных спин-волновых мод вблизи нее. Изучены две модели с идентичными примитивными кубическими решетками ФМ и АФМ полупространств, но с разным магнитным упорядочением АФМ. Показано, что в случае слоистого АФМ (рис. 1,а, модель I, рассмотренная в [7]) и АФМ с «шахматным» упорядочением (рис. 1,б, модель II, рассмотренная в настоящей работе) системы обладают существенно разными статическими и динамическими свойствами. Хотя геометрия реальных систем обычно более сложная,

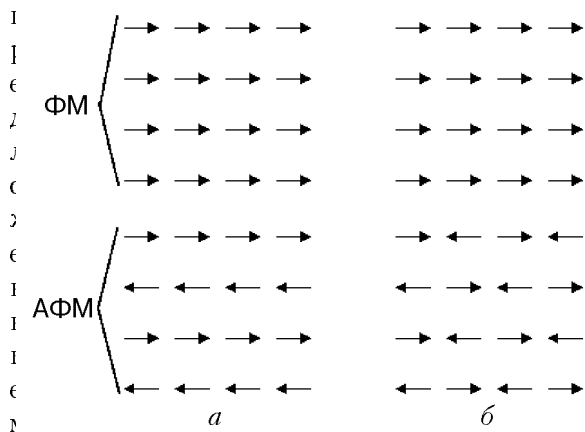


Рис. 1. Граница раздела ФМ и АФМ в случае слоистого АФМ (а) и при его «шахматном» упорядочении (б).

ли качественно описывают некомпенсированную [4,6] и скомпенсированную [5] границы раздела ФМ/АФМ соответственно.

С топологической точки зрения модели I и II существенно различны. В первом случае период магнитной структуры в направлении, параллельном границе раздела, совпадает с периодом решетки, а во втором случае — с удвоенным межатомным расстоянием. Поэтому коллинеарная структура с «правильным» упорядочением ФМ и АФМ полупространств в модели I (рис. 1,а) соответствует основному состоянию системы при любых параметрах магнетиков. В модели II коллинеарная структура с таким идеальным упорядочением (рис. 1,б) соответствует полностью фрустрированной границе ФМ/АФМ. В случае I доменные стенки, параллельные ФМ/АФМ границе, могут пересекать ее, превращаясь из ФМ в АФМ стенку. (Впервые на существование таких доменных границ указано в работе [4].) Поэтому описание и классификацию нетривиальных состояний в случае слоистого АФМ было естественно проводить в терминах коллинеарных и неколлинеарных доменных границ, взаимодействующих с границей раздела магнетиков [7]. В случае скомпенсированной ФМ/АФМ границы, доменная стенка исчезает на ней. Поэтому возможные коллинеарные и неколлинеарные магнитные структуры в данном случае существенно отличаются от таковых в модели I.

В настоящей работе изучены статические конфигурации границы раздела ФМ и АФМ с «шахматным» упорядочением (модель II). Аналогичная модель, но без одноионной анизотропии, была рассмотрена в работе [8]. Учет легкоосной анизотропии существенно меняет магнитную структуру границы раздела, приводя к

локализации неоднородности намагниченности вблизи нее. В отличие от случая слоистого АФМ, теперь задача не сводится к изучению одномерной спиновой цепочки, перпендикулярной ФМ/АФМ границе: на рис. 1,б видно, что четные и нечетные столбцы спинов находятся в разных состояниях.

В рамках классической модели Гейзенберга система описывается гамильтонианом

$$H = \sum_{m,\delta} \frac{J_{m,\delta}}{2} (\mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\delta}) + \sum_m \frac{B_m}{2} (\mathbf{S}_m \mathbf{e}_2)^2, \quad (1)$$

где m — узел решетки; δ — его ближайшие соседи; \mathbf{S}_m — вектор спина в этом узле; $J_{m,\delta} = -J_f$ и $J_{m,\delta} = J_a$ для ФМ и АФМ полупространств соответственно, $J_{m,\delta} = J_{fa}$ для обмена через границу ($J_f, J_a, J_{fa} > 0$); $B_m = B_f$ и $B_m = B_a$ — константы одноионной анизотропии для ФМ и АФМ полупространств соответственно и $B_f, B_a > 0$ для легкоосной анизотропии.

Для модели II основным состоянием системы в зависимости от значений параметров J, B является одна из трех коллинеарных структур (A, B и C) или неколлинеарная S (см. рис. 2). При достаточно большой константе анизотропии возможны и другие коллинеарные и неколлинеарные структуры. Им соответствуют доменные стенки, удерживаемые рельефом Пайерлса на конечном расстоянии от ФМ/АФМ границы и локальные минимумы энергии. Интересуясь лишь основным состоянием системы, мы не будем обсуждать их в дальнейшем.

От исходных семи параметров модели удобно перейти к четырем безразмерным величинам:

$$\beta_f = \frac{B_f}{J_f}, \beta_a = \frac{B_a}{J_a}, \rho = \left(\frac{J_a}{J_f} \right)^{1/2} \frac{S_a}{S_f}, j = \frac{J_{fa}}{\sqrt{J_a J_f}}. \quad (2)$$

При этом энергии коллинеарных структур (на одну элементарную ячейку поверхности раздела) равны

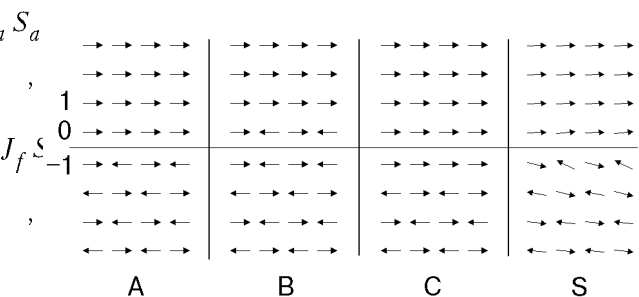


Рис. 2. Коллинеарные структуры границы раздела (A, B, C) и неколлинеарная структура S ($\beta_f = 0,2, \beta_a = 0,3, \rho = 0,4, j = 0,9$).

где $E_0 = \sqrt{J_f J_a} S_f S_a$.

Найдем соотношения между параметрами, при которых происходит бифуркационный переход из коллинеарной структуры (КС) в неколлинеарную (НКС). Как известно, система испытывает переход со спонтанным нарушением симметрии, когда одна из ее собственных частот обращается в нуль. Если воспользоваться уравнениями динамики намагниченности в полярных координатах (ось z совпадает с осью анизотропии) [9]

$$\sin \theta_m \frac{d\varphi_m}{dt} = -\frac{1}{\hbar S_m} \frac{\partial H}{\partial \theta_m}, \quad \sin \theta_m \frac{d\theta_m}{dt} = \frac{1}{\hbar S_m} \frac{\partial H}{\partial \varphi_m}, \quad (4)$$

где $\mathbf{S}_m = S_m(\sin \theta_m \cos \varphi_m, \sin \theta_m \sin \varphi_m, \cos \theta_m)$, то в КС величина $d\varphi_m/dt = \omega$ задает частоту прецессии спина вокруг легкой оси, которая обращается в нуль в точке перехода КС–НКС.

В коллинеарных структурах в положении равновесия угол θ_m равен 0 или π . В тех узлах, где в равновесии $\theta_m = \pi$, введем новое обозначение для малого угла поворота спина $\theta_m \rightarrow \theta_m + \pi$. Переход КС–НКС определяется условием существования нетривиальных решений линеаризованных статических уравнений

$$\left. \frac{\partial H}{\partial \theta_m} \right|_{\theta_m \rightarrow 0} = 0. \quad (5)$$

Объемный гамильтониан ферромагнетика записывается в виде

$$H_F = - \sum_{m,\delta} \frac{J_f S_f^2}{2} \cos(\theta_m - \theta_{m+\delta}) + \sum_m \frac{B_f S_f^2}{2} \sin^2 \theta_m. \quad (6)$$

Как видно на рис. 1,б, система периодична с периодом $2a$ (a – постоянная решетки) в плоскости границы раздела. Обозначим полярные углы четных и нечетных спиновых столбцов через $\theta_n^{(1)}$ и $\theta_n^{(2)}$ соответственно. Из (5) и (6) получаем уравнения для ферромагнитного полупространства

$$\theta_n^{(1)} (6 + \beta_f) - 4\theta_n^{(2)} - \theta_{n-1}^{(1)} - \theta_{n+1}^{(1)} = 0, \quad (7)$$

$$\theta_n^{(2)} (6 + \beta_f) - 4\theta_n^{(1)} - \theta_{n-1}^{(2)} - \theta_{n+1}^{(2)} = 0,$$

где n – номер слоя. Эти уравнения должны быть дополнены условием убывания $\theta_n^{(1)}$ и $\theta_n^{(2)}$ при $n \rightarrow +\infty$. Общее решение системы (7) имеет вид

$$\theta_n^{(1)} = A_1 P_{f1}^n + A_2 P_{f2}^n, \quad \theta_n^{(2)} = A_1 P_{f1}^n - A_2 P_{f2}^n, \quad (8)$$

где

$$P_{f1} = P(\beta_f), \quad P_{f2} = P(8 + \beta_f), \quad (9)$$

$$P(\beta) = 1 + \frac{\beta}{2} - \left(\beta + \frac{\beta^2}{4} \right)^{1/2}. \quad (10)$$

Аналогично получается решение для антиферромагнетика:

$$\theta_n^{(1)} = B_1 P_{a1}^{-n-1} + B_2 P_{a2}^{-n-1}, \quad (11)$$

$$\theta_n^{(2)} = B_1 P_{a1}^{-n-1} - B_2 P_{a2}^{-n-1},$$

где

$$P_{a1} = P(\beta_a), \quad P_{a2} = P(8 + \beta_a). \quad (12)$$

Подстановка выражений (8)–(12) в статические уравнения для четырех неэквивалентных приграничных узлов дают систему четырех линейных однородных уравнений относительно неизвестных A_1, A_2, B_1, B_2 . Так, например, для коллинеарной конфигурации A из уравнений для спиновых отклонений (номер $n = 0$ соответствует первому слою в ФМ полупространстве)

$$\theta_0^{(1)}(5 + \beta_f + \rho j) - 4\theta_0^{(2)} - \theta_1^{(1)} - \rho j \theta_{-1}^{(1)} = 0,$$

$$\theta_0^{(2)}(5 + \beta_f - \rho j) - 4\theta_0^{(1)} - \theta_1^{(2)} + \rho j \theta_{-1}^{(2)} = 0, \quad (13)$$

$$\theta_{-1}^{(1)}(5 + \beta_a + j/\rho) - 4\theta_{-1}^{(2)} - \theta_{-2}^{(1)} - j/\rho \theta_0^{(1)} = 0,$$

$$\theta_{-1}^{(2)}(5 + \beta_a - j/\rho) - 4\theta_{-1}^{(1)} - \theta_{-2}^{(2)} + j/\rho \theta_0^{(2)} = 0,$$

получаем

$$A_1 F_{f1} + A_2 \rho j - B_2 \rho j = 0,$$

$$A_2 F_{f2} + A_1 \rho j - B_1 \rho j = 0, \quad (14)$$

$$B_1 F_{a1} + B_2 j/\rho - A_2 j/\rho = 0,$$

$$B_2 F_{a2} + B_1 j/\rho - A_1 j/\rho = 0,$$

где

$$F_{f, a1} = F(\beta_{f, a}), \quad F_{f, a2} = F(8 + \beta_{f, a}), \quad (15)$$

$$F(\beta) = \frac{\beta}{2} + \left(\beta + \frac{\beta^2}{4} \right)^{1/2}. \quad (16)$$

Равенство нулю определителя системы уравнений (14) задает связь между критическими значениями параметров j , ρ , β_f , β_a :

$$j = \frac{F_{f1} F_{f2} F_{a1} F_{a2}}{(F_{f1}/\rho + F_{a1}\rho)(F_{f2}/\rho + F_{a2}\rho)} \quad (17)$$

Аналогично получаем:
для структуры B

$$\begin{aligned} (\beta_f + F_{f1} + G_{f1})(-8 + \beta_f + F_{f2} + G_{f2}) = \\ = F_{f1}F_{f2}(\beta_f + G_{f1})(-8 + \beta_f + G_{f2}); \quad (18) \end{aligned}$$

для структуры C

$$\begin{aligned} (\beta_a + F_{a1} + G_{a1})(-8 + \beta_a + F_{a2} + G_{a2}) = \\ = F_{a1}F_{a2}(\beta_a + G_{a1})(-8 + \beta_a + G_{a2}), \quad (19) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} G_{f1,2} = j\rho \left(1 - \frac{1}{1 + F_{a1,2}\rho/j} \right), \\ G_{a1,2} = j/\rho \left(1 - \frac{1}{1 + F_{f1,2}/(\rho j)} \right). \quad (20) \end{aligned}$$

Выражения (17)–(19) и (3) позволяют найти основное состояние системы в зависимости от значений параметров β_f , β_a , ρ и j , т.е. построить ее фазовую диаграмму в четырехмерном пространстве этих параметров.

Параметр ρ характеризует различие магнитных свойств ФМ и АФМ, а параметр j описывает влияние границы как локализованного магнитного дефекта. Для наглядности вначале остановимся на частном случае $\beta_f = \beta_a = \beta$ и $\rho = 1$, когда магнетики в двух полупространствах характеризуются одинаковыми константами

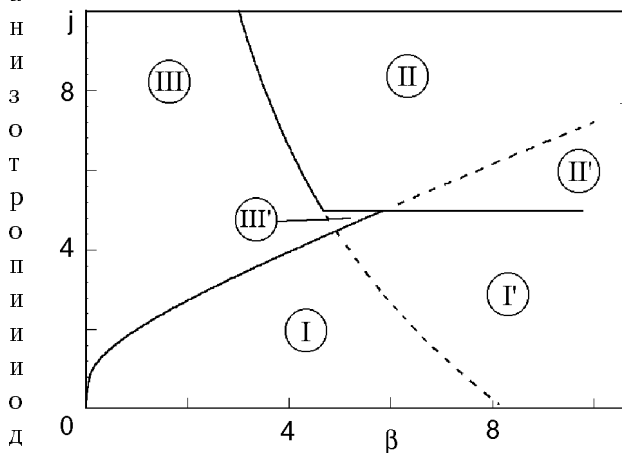


Рис. 3. Фазовая диаграмма ФМ/АФМ границы при $\beta_f = \beta_a = \beta$ и $\rho = 1$.

ковой величиной обменного взаимодействия. В этом случае проявляется влияние на форму основного состояния границы раздела как точечного магнитного дефекта. На рис. 3 представлена плоскость параметров β и j и границы раздела различных фаз. В рассматриваемом случае выражения (18) и (19) совпадают, и коллинеарные структуры B и C имеют одинаковые энергии. В областях I и I' основным состоянием является коллинеарная фаза A . При этом в области I' кроме основного минимума энергии, соответствующего фазе A , имеются дополнительные локальные минимумы с большими энергиями для коллинеарных фаз B и C . В областях II и II' основной минимум отвечает фазам B и C (в области II' возможна также метастабильная фаза A). Наконец, области III и III' соответствуют скошенным фазам S , и в области III' возможны метастабильные фазы B и C .

Чтобы изучить влияние неидентичности

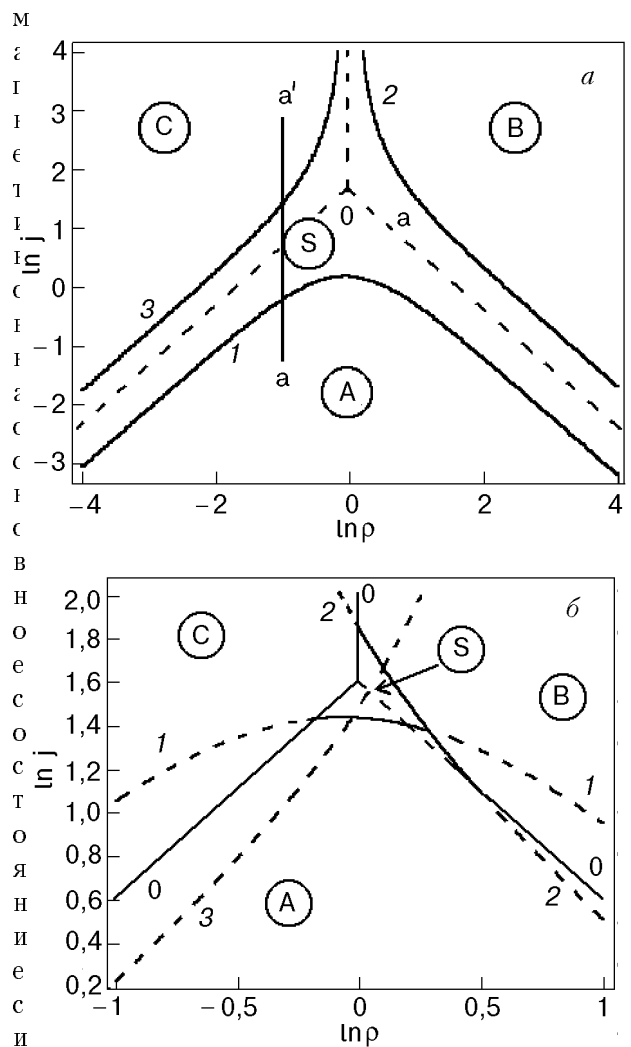


Рис. 4. Фазовая диаграмма ФМ/АФМ границы для $\beta_f = 0,2$, $\beta_a = 0,3$ (а) и $\beta_f = 4$, $\beta_a = 5$ (б). Линии 1, 2, 3 описываются уравнениями (17), (18), (19) соответственно.

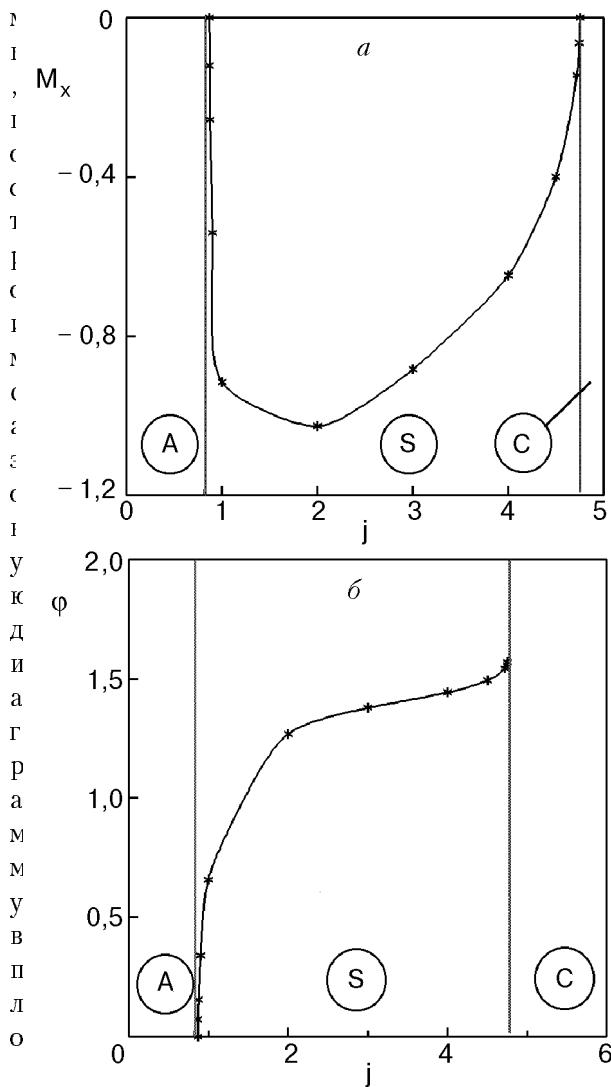


Рис. 5. Изменение структуры неколлинеарной фазы с величиной j для $S_f = S_a = 1$, $\beta_f = 0,2$, $\beta_a = 0,3$, $\rho = 0,4$: зависимость x -компоненты полной намагниченности (а); угол разворота вектора антиферромагнетизма в приграничном слое АФМ (б).

и $(\ln \rho, \ln j)$ для фиксированных β_f и β_a (рис. 4). На рис. 4,а приведена фазовая диаграмма для случая относительно небольших β_f , β_a . При этом области трех коллинеарных структур (А, В и С) отделены друг от друга областью скошенной структуры (S). На отрезках прямых линий $j = 5/\rho$, $j = 5\rho$ и $\rho = 1$ энергии двух из коллинеарных фаз становятся равными. Линии 1, 2, 3, отделяющие области коллинеарных фаз от области скошенной фазы, описываются уравнениями (17), (18) и (19) соответственно. При больших значениях β_f и β_a фазовая диаграмма меняется (рис. 4,б). По-прежнему на отрезках прямых линий энергии коллинеарных фаз равны, но теперь эти прямые могут пересекаться с линиями 1, 2, 3, определяемыми уравнениями (17), (18), (19). Границы раздела

фаз отмечены на рисунке сплошными линиями. Как видно из рисунка, при больших значениях анизотропии возможен непосредственный переход между коллинеарными фазами без промежуточной скошенной фазы. Анализ выражения (18) показывает, что структура В не существует при $\beta_f < 0,011324$, а при $\beta_f > 8,234057$ является локальным минимумом энергии для любых ρ , j и бифуркационный переход $B \rightarrow S$ не происходит. То же самое верно для β_a и структуры С.

Численный поиск методом релаксации конфигурации с минимальной энергией позволил определить конкретный вид неколлинеарной структуры. При изменении параметров системы происходит перестройка неколлинеарной фазы, сопровождаемая изменением полной намагниченности системы и разворотом векторов намагниченности и антиферромагнетизма. На рис. 5,а изображено изменение x -компоненты полной намагниченности (ось x выбрана в направлении, перпендикулярном границе ФМ/АФМ) с изменением параметра j при фиксированных значениях ρ , β_f и β_a ($\rho = 0,4$, $\beta_f = 0,2$, $\beta_a = 0,3$), т.е. при движении вдоль линии aa' на рис. 4,а. На рис. 5,б показано изменение угла разворота вектора антиферромагнетизма в атомном слое, прилегающем к границе раздела ФМ/АФМ, от значения $\phi = 0$ в А-фазе до значения $\phi = \pi/2$ в С-фазе.

Авторы благодарят С. Л. Гнатченко и А. Б. Безносова за полезное обсуждение проблемы.

1. W. P. Meiklejohn and C. P. Bean, *Phys. Rev.* **102**, 1413 (1956).
2. К. Б. Власов, А. И. Мицек, *ФММ* **14**, 487 (1962).
3. R. E. Camley and R. L. Stamps, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 3727 (1993).
4. C. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, and E. Kay, *J. Appl. Phys.* **62**, 3047 (1987).
5. N. C. Koon, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4865 (1997).
6. R. L. Stamps, R. E. Camley, and R. J. Hicken, *Phys. Rev.* **B54**, 4159 (1996).
7. А. Г. Гречнев, А. С. Ковалев, *ФНТ* **24**, 340 (1998).
8. Y. Matsushita, M. P. Gelfand, and C. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 3648 (1997).
9. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).

Magnetic structure of the ferro-antiferromagnet interface. II. Compensated interface

A. G. Grechnev and A. S. Kovalev

A ferro-antiferromagnet compensated interface is studied in the framework of a discrete classical spin

model. A phase diagram is presented for some possible collinear and canted magnetic structures of the interface. The behavior of magnetization transforma-

tion under the collinear-canted transition is investigated.