

О неоднородных состояниях для малых магнитных частиц с обменной анизотропией

Б. А. Иванов^{1,2}, А. Я. Волк², А. Ю. Меркулов²

¹ *Институт магнетизма НАН Украины, пр. Вернадского, 36 б, г. Киев, 03142, Украина*

² *Киевский университет им. Тараса Шевченко, пр. Глушкова, 2, г. Киев, 03127, Украина*
E-mail: bivanov@i.com.ua

Статья поступила в редакцию 5 июня 2001 г.

Для ферромагнитной частицы с обменной анизотропией при наличии магнитного поля, перпендикулярного легкой оси, может возникать состояние с неоднородным распределением спинов. Наличие неоднородных состояний существенно модифицирует стандартную зависимость намагниченности частицы от магнитного поля. На основе сравнения результатов с решениями в континуальном приближении проведено уточнение вида граничных условий в макроскопических уравнениях для намагниченности.

Для ферромагнітної частинки з обмінною анізотропією при наявності магнітного поля, перпендикулярного до легкій вісі, може виникати стан з неоднорідним розподілом спінів. Наявність неоднорідних станів суттєво модифікує стандартну залежність намагніченості частинки від магнітного поля. На основі порівняння результатів з розв'язками в континуальному наближенні проведено уточнення виду граничних умов в макроскопічних рівняннях для намагніченості.

PACS: 03.65.-w, 75.10.Jm, 75.30.Gw

Последние десять лет в физике магнетизма уделяется большое внимание искусственным магнитным структурам, содержащим ферромагнитные элементы (пленки, гранулы, магнитные точки) с характерным размером порядка десятков или сотен нанометров, разделенных немагнитными прослойками. Такие материалы важны для практических приложений (высокоплотная магнитная запись; использование эффектов гигантского магнитосопротивления и гигантского магнитоимпеданса) и интересны как принципиально новые объекты фундаментальной физики магнетизма [1–7]. Понятно, что для таких материалов роль поверхности становится существенно более важной, чем для объемных материалов. Специфика поверхности в реальных магнетиках возникает в силу двух обстоятельств. Во-первых, спины даже на идеальной атомно-гладкой поверхности и в объеме имеют разное координационное число и, следовательно, разную интенсивность обменного взаимодействия. Во-вторых, в реальных магнети-

ках поверхностные атомы имеют иную симметрию окружения, что может приводить к специфической одноионной анизотропии для спинов на поверхности с избранной осью, совпадающей с вектором нормали к поверхности.

В физике магнетизма существуют два подхода к анализу статических и динамических задач: микроскопический и макроскопический. Микроскопический подход базируется на использовании дискретного спинового гамильтониана, в котором спины \mathbf{S}_I (квантовые или рассматриваемые квазиклассически) заданы в узлах решетки I . В дискретных моделях магнитная анизотропия может быть введена двумя различными способами: как одноионная и как анизотропия обменного взаимодействия. В спиновом гамильтониане эти анизотропии описываются слагаемыми $H_a^{(SI)}$ и $H_a^{(e)}$ соответственно. В случае ферромагнетика с обменной анизотропией типа легкая ось гамильтониана выбирается в виде

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{\delta}} [S_{\mathbf{l}}^z S_{\mathbf{l}+\mathbf{\delta}}^z + \gamma (S_{\mathbf{l}}^x S_{\mathbf{l}+\mathbf{\delta}}^x + S_{\mathbf{l}}^y S_{\mathbf{l}+\mathbf{\delta}}^y)] , \quad (1)$$

где J – обменный интеграл, γ – параметр анизотропии обменного взаимодействия, $\mathbf{\delta}$ – векторы ближайших соседей. В этом случае анизотропный гамильтониан $H_a^{(e)}$ (второе слагаемое под суммой) определяется неравенством констант взаимодействия компонент спина $S_{\mathbf{l}}^{x,y}$ и $S_{\mathbf{l}}^z$, т.е. величиной $1 - \gamma$, $\gamma < 1$. Одноионная анизотропия учитывается добавлением к изотропному (с $\gamma = 1$) обменному гамильтониану H_e (1) слагаемого $H_a^{(SI)}$

$$H_a^{(SI)} = -\frac{K}{2} \sum_{\mathbf{l}} [(S_{\mathbf{l}}^z)^2] , \quad K > 0 . \quad (2)$$

Исследование существенно неоднородных состояний для микроскопического гамильтониана (1) провел Гочев. Им построены точные одномерные решения, описывающие доменную стенку [8] и неоднородные состояния, локализованные вблизи поверхности [9]. В частности, в работе [8] указано уникальное свойство модели (1), состоящее в том, что при любом, даже очень большом, значении анизотропии, когда толщина доменной стенки сравнима с постоянной решетки, пиннинг стенки отсутствует. По-видимому, это демонстрирует особые свойства модели, близкие к свойствам точно интегрируемых моделей. Обобщение результатов Гочева на более общие модели, например, учет одноионной анизотропии (2) или интересующий нас учет внешнего магнитного поля, перпендикулярного легкой оси, не представляется возможным. Поэтому работы [8,9] являются исключением, и исследование микроскопического гамильтониана обычно производится численно, для больших, но конечных решеток. В этом случае особая роль поверхности проявляется непосредственно для первого механизма, учет специфической одноионной анизотропии также может быть легко проведен заменой $K \rightarrow K_s \neq K$ для спинов на поверхности. Отметим, что при описании макроскопических неоднородностей намагниченности в слабоанизотропных материалах с $H_a \ll H_e$ оба описанных выше способа введения анизотропии полностью эквивалентны, что неоднократно отмечалось в литературе, но модели с обменной анизотропией существенно более удобны для численного исследования.

В макроскопическом подходе, который в течение длительного времени был основным при исследовании макроскопических неоднородностей намагниченности, таких как домены и доменные структуры, магнитные солитоны и т.д., состояние

магнетика описывается нормированным (единичным) вектором намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$, $\mathbf{m}^2 = 1$. При описании макроскопических неоднородностей намагниченности в слабоанизотропных материалах (при $1 - \gamma \ll 1$ или $K \ll J$) оба описанных выше способа введения анизотропии полностью эквивалентны и дают плотность энергии магнитной анизотропии в виде

$$w_a = -\frac{1}{2} \beta m_z^2 ,$$

где константа $\beta = Z(1 - \gamma)JS^2/2a^3$ (Z – координационное число решетки, a – постоянная решетки) или $\beta = KS^2/a^3$ для случаев обменной или одноионной анизотропии соответственно. Ниже мы покажем, что при учете поверхности эта эквивалентность отсутствует, что приводит к важным эффектам, в частности, к появлению нового механизма формирования неоднородных состояний малых магнитных частиц.

В настоящей работе показано, что в случае обменной анизотропии при наличии магнитного поля, перпендикулярного легкой оси, может возникать состояние частицы с неоднородным распределением спинов, в то время как в случае одноионной анизотропии этот эффект отсутствует. Отметим, что анализ неоднородных состояний, вызванных магнитным диполь-дипольным взаимодействием, является одной из важнейших задач физики магнетизма. В последние годы интерес к таким состояниям для субмикронных частиц значительно возрос [5,6,10–14]. Предложенный нами механизм иной, и неоднородные состояния возникают только благодаря наличию поверхности и внешнего магнитного поля, но не связаны с дипольным взаимодействием. Чтобы его объяснить, отметим, что в присутствии магнитного поля $H < H_a$ (H_a – поле анизотропии) магнитный момент составляет с легкой осью угол θ_0 ,

$$\sin \theta_0 = \frac{H}{H_a} , \quad (3)$$

в случае обменной анизотропии $H_a = (1 - \gamma) \times SZJ/2\mu_B$, где μ_B – магнетон Бора. Ясно, что вблизи поверхности координационное число Z' меньше, чем в объеме: $Z' < Z$. Поэтому следует ожидать, что отклонение спинов от легкой оси вблизи поверхности будет больше, чем в объеме. Характер распределения спинов в этом состоянии определяется как разностью величин полей анизотропии на поверхности и в объеме, так и обменным взаимодействием спинов. Анализ этой задачи

проведен нами на основе численного и аналитического исследований дискретного гамильтониана, без предположения о малости анизотропии. На основе сравнения результатов с решениями в континуальном приближении проведено уточнение вида и характера граничных условий для намагниченности.

Рассмотрим модель ферромагнетика, занимающего полупространство $x > 0$, в которой поверхность является идеально гладкой атомной плоскостью, совпадающей с плоскостью $x = 0$, межатомное расстояние равно a . Для выяснения основных закономерностей задачи достаточно рассмотреть полубесконечную цепочку атомов (рис. 1). Будем считать, что магнитная анизотропия возникает из-за анизотропии обменного взаимодействия, т.е. система описывается гамильтонианом (1). Учтем дополнительно внешнее магнитное поле, которое перпендикулярно легкой оси, в нашем случае оси z . Пусть атомы на по-

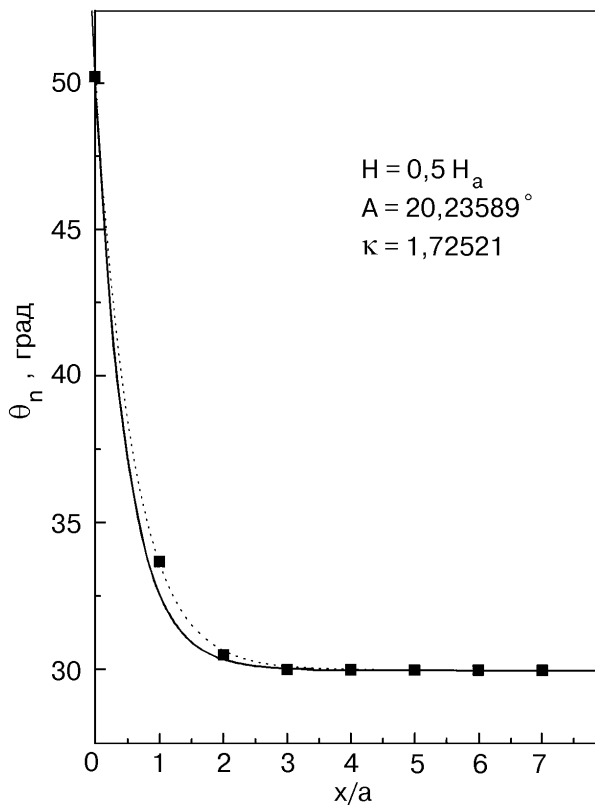


Рис. 1. Отклонения спинов от оси анизотропии для модели Изинга и значения магнитного поля $H = 0,5H_a$. Точки — численно найденные отклонения в положениях атомов; сплошная кривая построена с использованием экспоненциальной зависимости (7), штриховая линия представляет подгонку зависимости (7) к численным значениям путем выбора параметров A , θ и κ . Найденные подгонкой значения A и κ приведены в правом верхнем углу рисунка.

верхности ничем не отличаются от атомов в объеме, кроме разного количества ближайших соседей. Гамильтониан цепочки представим в следующем виде:

$$\hat{H} = -J \sum_{n=1}^{\infty} [\cos \theta_n \cos \theta_{n+1} + \gamma \sin \theta_n \sin \theta_{n+1} \times \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1}) + h \sin \theta_n \cos \varphi_n] . \quad (4)$$

Здесь θ_n и φ_n — угловые переменные для атомных спинов в цепочке; $h = 2\mu_B H/J$ — безразмерное магнитное поле. Граничному атому приписывается номер $n = 1$. Очевидно, что основному состоянию отвечает $\varphi_n = 0$, и далее необходимо минимизировать данную энергию по значениям углов $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ и т.д. Таким образом, мы получаем бесконечную систему трансцендентных уравнений, решить которую аналитически не представляется возможным. Поэтому ниже проанализируем эту задачу численно; при этом, естественно, будет решаться задача для цепочки относительно большой, но все же конечной длины. Однако существует важный предельный случай, когда задача может быть решена аналитически.

Как численный анализ, так и простые аргументы показывают, что при наличии поверхности отклонения переменных θ_n от θ_0 невелики, θ_0 — угол отклонения спина от легкой оси в магнетике без учета поверхности (3). Понятно, что если приложенное магнитное поле мало, то и отклонение θ_0 мало. Если же H велико, то характерный размер неоднородности увеличивается и роль поверхностных состояний становится незначительной; как результат — все меньше и меньше становится отклонение θ_n от θ_0 . Поэтому углы отклонения от положения равновесия θ_n можно разложить на слагаемые

$$\theta_n = \theta_0 + \xi_n \quad (5)$$

и считать, что величины ξ_n малы. Поскольку поверхностные спины находятся в несколько ином положении, чем все остальные, необходимо отдельно записать уравнения для ξ_1, ξ_2 и всех остальных атомов ξ_n с $n \geq 3$. Для последних уравнения не содержат поверхностного отклонения ξ_1 и имеют такой же вид, как и в безграничном магнетике:

$$\frac{\partial H}{\partial \xi_n} = 2(\gamma - 1) \cos^2 \theta_0 \xi_n - [1 + (\gamma - 1) \cos^2 \theta_0](2\xi_n - \xi_{n-1} - \xi_{n+1}) = 0 . \quad (6)$$

В силу этого обстоятельства решение нашей системы уравнений можно искать в виде

$$\xi_n = A e^{-(n-1)\kappa}, \quad (7)$$

где A — некоторая константа. Экспоненциальная зависимость (7) для спинов в глубине кристалла следует из теоремы Блоха. Величина κ , которая определяет характер экспоненциального затухания, находится из (6):

$$\operatorname{sh}^2 \frac{\kappa}{2} = \frac{0,5(1-\gamma) \cos^2 \theta_0}{\sin^2 \theta_0 + \gamma \cos^2 \theta_0}. \quad (8)$$

В отсутствие магнитного поля ($\theta_0 = 0$) эта формула совпадает с выражением Гочева [8] для толщины доменной стенки в модели (1) при произвольном значении параметра анизотропии γ . Если же анизотропия мала, т.е. в случае $\gamma - 1 \ll 1$, выражение (8) принимает стандартный вид:

$$\kappa = \sqrt{2(1-\gamma)}.$$

Анализ показал, что экспоненциальная подстановка не противоречит также и уравнению (6) с $n = 2$, а из уравнения, получающегося вариацией по величине граничного спина θ_1 , может быть найдено значение константы A :

$$A = \frac{(1-\gamma) \sin \theta_0 \cos \theta_0}{e^\kappa - 1 - (1-\gamma)(e^\kappa \cos^2 \theta_0 - \sin^2 \theta_0)}. \quad (9)$$

Это громоздкое выражение несколько упрощается для модели Изинга ($\gamma = 0$), которая характеризуется предельно большой анизотропией:

$$A^{\text{Ising}} = \frac{\sin \theta_0 \cos \theta_0}{\sin^2 \theta_0 + \cos \theta_0 \sqrt{1 + \sin^2 \theta_0}}. \quad (10)$$

В этом случае при $\theta_0 \rightarrow 0$, т.е. для слабого поля, $A \rightarrow \theta_0$, а для поля, близкого к полю анизотропии ($\theta_0 \rightarrow \pi/2$), величина A мала, $A \rightarrow \cos \theta_0$. Существенное упрощение возникает в предельном случае слабоанизотропного магнетика, при $1 - \gamma \ll 1$ имеем

$$A^{wa} = \frac{\sqrt{1-\gamma} \sin \theta_0}{2} \ll \theta_0. \quad (11)$$

Из этих предельных выражений следует, что предположение о малости A не лишено смысла в широком интервале значений параметров. Действительно, для слабоанизотропного магнетика оно

выполняется автоматически, см. (11), в силу того, что в этом случае величина κ мала и поверхностный спин «подстраивается» к объемным. Это же справедливо для больших полей, когда $\kappa \ll 1$ даже для большой анизотропии, в том числе модели Изинга. С другой стороны, для малых полей сама величина θ_0 мала, и хотя может оказаться, что A порядка θ_0 (для модели Изинга в пределе малых полей $A \rightarrow \theta_0$), условие $A \ll 1$, достаточное для применимости линейного приближения, остается в силе. Таким образом, получается, что использованное нами линейное приближение и полученные на его основе формулы (9)–(11) применимы, во всяком случае качественно, для широкого класса моделей, включая сильноанизотропные.

Для проверки предположения о применимости линейного приближения был проведен также численный анализ задачи для модели Изинга. Выбрано значение поля $H = 0,5H_a$, т.е. $\theta_0 = 30^\circ$, которое с точки зрения применимости линейной теории соответствует наименее благоприятной ситуации: с одной стороны, величина κ не мала, из формулы (8) следует, что $\kappa = 2,0634$, с другой — не мало значение A , расчет на основе (10) дает $A = 20,365^\circ$. Видно, что численные расчеты (см. рис. 1) находятся в хорошем соответствии с полученной аналитической формулой даже для случая, когда величина κ не очень мала, и характерный масштаб изменения намагниченности, a/κ , меньше постоянной решетки a .

Если рассмотреть реальную малую частицу, ограниченную со всех сторон, то ситуация становится сложнее, и задача может быть проанализирована только численно. Мы исследовали распределение спинов в квадратной частице 10×10 , которая описывается гамильтонианом модели Изинга. На рис. 2 представлены проекции атомных спинов на направление поля в двумерной решетке. На каждом из рис. 2, а–в, соответствующих разным значениям поля, стрелки, изображающие проекции спинов, представлены в разных масштабах. Эти стрелки отображают относительные длины векторов, соответствующие разным точкам одного и того же рисунка. Абсолютные величины отклонений в характерных точках представлены в описаниях к каждому рисунку. На рис. 3 приведены кривые намагниченности частицы, которые показывают, что наличие неоднородных состояний существенно модифицирует стандартную (линейную, в силу соотношения $\sin \theta_0 = H/H_a$ для однородного распределения) зависимость.

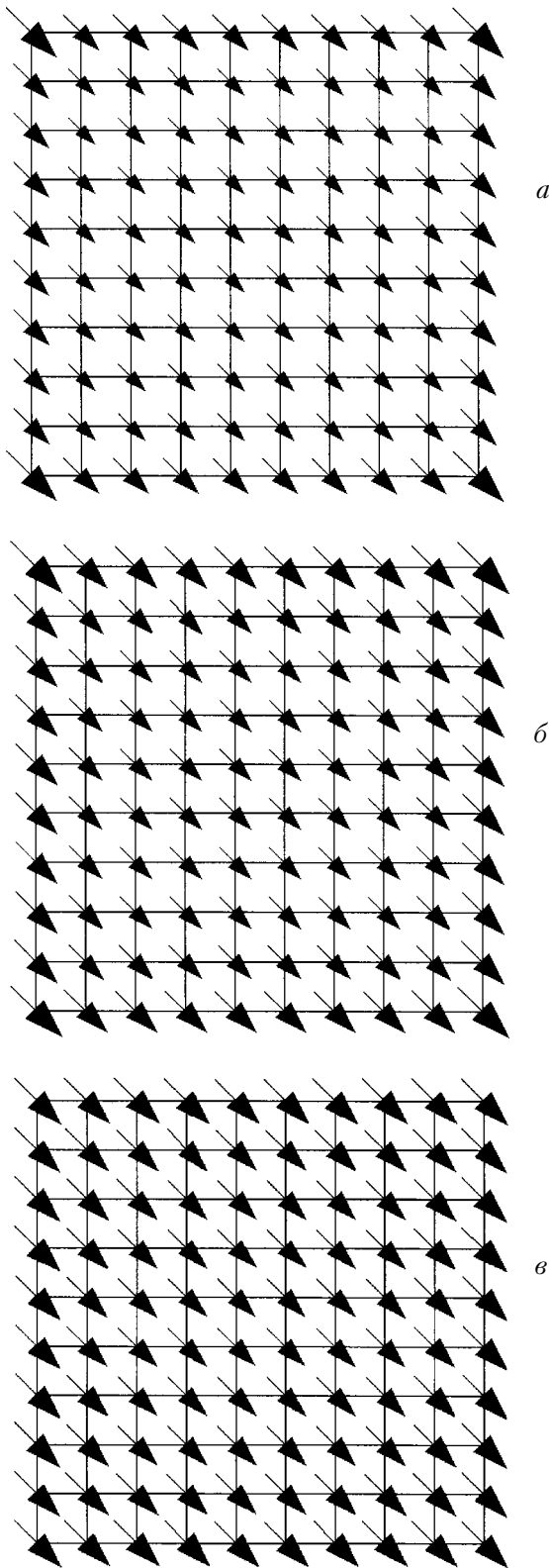


Рис. 2. Неоднородные состояния для квадратной частицы при различных значениях поля, стрелки описывают относительный масштаб неоднородности компонент спина в направлении поля, значения θ в углу, на середине грани и в центре квадрата соответственно указаны в описании рис. *a, б, в*: *a* — $H/H_a = 0,2$; $22,6^\circ$, $15,4^\circ$, $11,5^\circ$; *б* — $H/H_a = 0,5$; $53,5^\circ$, $39,9^\circ$, 30° ; *в* — $H/H_a = 0,8$; $79,9^\circ$, $68,6^\circ$, $53,3^\circ$.

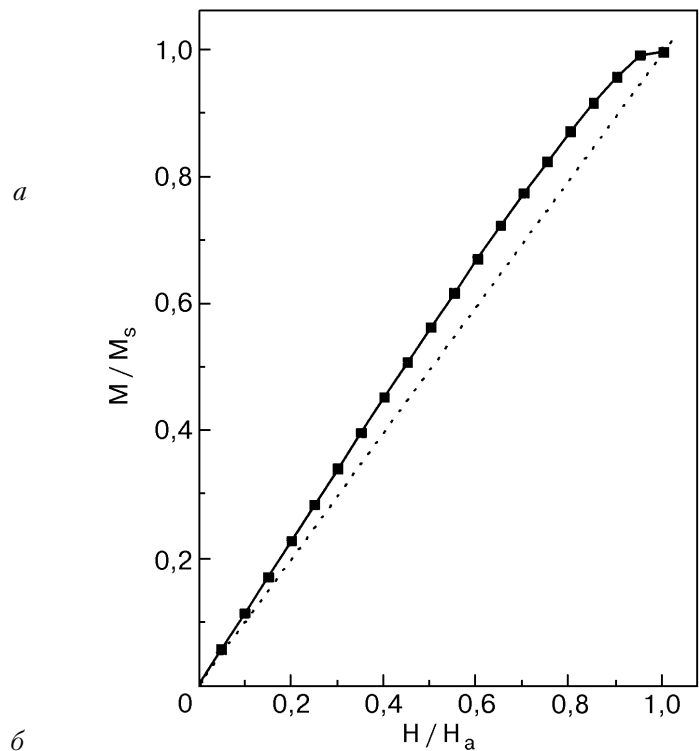


Рис. 3. Кривая намагничивания для квадратной частицы; линия с символами найдена численно для частицы с обменной анизотропией, находящейся в неоднородном состоянии, штриховая линия соответствует теоретической линейной зависимости намагниченности от поля без учета неоднородных состояний.

Численный анализ показал, что отклонение атомных спинов на поверхности отличается от отклонения спинов в объеме. Однако наибольшая величина отклонения имеет место для спинов, расположенных в углах решетки. Интуитивно этот результат ясен: угловые спины имеют еще меньшее координационное число, чем спины, расположенные в регулярных точках поверхности. В связи с этим возникает проблема, каким образом можно перейти от дискретного к макроскопическому описанию подобных эффектов, хотя бы в той области значений параметров задачи, когда $k \ll 1$, градиенты малы и, по крайней мере для объемной части частицы, макроскопический подход должен быть адекватным [15–17].

При макроскопическом подходе вид функции $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ определяется решением дифференциальных микромагнитных уравнений, а свойства поверхности учитываются путем выбора тех или иных граничных условий для этих решений. Вопрос, касающийся учета поверхностей, был поставлен еще в пятидесятых годах и считается детально изученным. В частности, является общепризнанным, что для идеальной атомно-гладкой поверхности, свойства атомов на которой такие же, как

в объеме, для намагниченности надо выбрать свободные граничные условия $n_i(\partial_i \mathbf{m} / \partial x_i) = 0$, где \mathbf{n} — вектор нормали к поверхности [15–17]. Если же считать, что существует специфическая поверхностная одноионная анизотропия с объемной плотностью

$$\omega_s = \frac{1}{2} K_s^* (\mathbf{m}\mathbf{n})^2 \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_s|), \quad (12)$$

где \mathbf{r}_s — вектор, параметризующий поверхность, граничные условия выбираются в виде

$$\left[\mathbf{m}, \left(A n_i \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial r_i} + K_s^* (\mathbf{m}\mathbf{n}) \mathbf{n} \right) \right] = 0, \quad (13)$$

где A — константа неоднородного обмена. Граничные условия (13) включают некоторую универсальную характеристику магнетика $\kappa^* = K_s^*/A$. Таким образом, считается установленным, что граничные условия характеризуются одним параметром с размерностью длины $1/\kappa^*$ и отличаются от свободных только при наличии в системе специфической поверхностной одноионной анизотропии.

Наши аналитические и численные результаты для спиновой цепочки можно описать на этой основе с использованием эффективной энергии анизотропии $\omega_a = -\beta m_z^2/2$, $\beta = 2(1 - \gamma)JS^2/2a^3$, если учесть, что направление оси поверхностной анизотропии совпадает с объемной, а не с нормалью к поверхности, и провести определенную модификацию граничных условий, записав их в виде

$$\left[\mathbf{m}, \left(JS^2 a n_i \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial r_i} + K_s (\mathbf{e}_z \mathbf{m}) \mathbf{e}_z \right) \right] = 0 \quad (14)$$

со значением $K_s = (1 - \gamma)JS^2$. Это же справедливо и для неоднородных задач при соответствующем выборе $K_s = (Z - Z')(1 - \gamma)JS^2$, но только в том случае, если не принимать во внимание нерегулярные точки поверхности типа отмеченных выше точек в углах квадратной частицы. Для макроскопических образцов такие точки, по-видимому, не очень существенны, но для нанометровых частиц макроскопическая теория нуждается в модификации.

Мы благодарны Н. А. Усову за полезные обсуждения. Работа поддержана грантом INTAS 97-31 311.

1. A. E. Berkowitz, J. R. Mitchell, M. J. Carey, A. P. Young, S. Zhang, F. E. Spada, F. T. Parker, A. Hutten, and G. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3745 (1992).
2. B. Hillebrands, C. Mathieu, C. Hartmann, M. Bauer, O. Buettner, S. Riedling, B. Roos, S. O. Demok-

- ritov, B. Bartenlian, C. Chappert, D. Decanini, F. Rosseaux, E. Cam, A. Muller, B. Hoffmann, and U. Hartmann, *J. Magn. Magn. Mater.* **75**, 10 (1997).
3. M. Grimsditch, Y. Jaccard, and I. K. Shuller, *Phys. Rev.* **B58**, 11539 (1998).
4. C. Mathieu, C. Hartmann, M. Bauer, O. Buettner, S. Riedling, B. Roos, S. O. Demokritov, B. Hillebrands, B. Bartenlian, C. Chappert, D. Decanini, F. Rousseaux, E. Cambil, A. Muller, B. Hoffman, and U. Hartman, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2912 (1997).
5. E. F. Wassermann, M. Thielen, S. Kirsch, A. Pollmann, H. Weinforth, and A. Carl, *J. Appl. Phys.* **83**, 1753 (1998).
6. K. Runge, Y. Nozaki, Y. Otani, H. Miyajima, B. Pannetier, T. Matsuda, and A. Tonomura, *J. Appl. Phys.* **79**, 5075 (1996).
7. R. P. Cowburn, A. O. Adeyeye, and M. E. Welland, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5415 (1998).
8. И. Г. Гочев, *ЖЭТФ* **85**, 199 (1983).
9. И. Г. Гочев, *ФТТ* **10**, 615 (1984).
10. N. A. Usov and S. E. Peschany, *J. Magn. Magn. Mater.* **130**, 275 (1994); R. P. Cowburn and M. E. Welland, *Phys. Rev.* **B58**, 9217 (1998); R. P. Cowburn, A. O. Adeyeye, and M. E. Welland, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5415 (1998).
11. N. A. Usov and S. E. Peschany, *J. Magn. Magn. Mater.* **118**, L290 (1993).
12. A. Fernandez and C. J. Cerjan, *J. Appl. Phys.* **87**, 1395 (2000).
13. Jing Shi, S. Tehrani, and M.R. Scheinfein, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2588 (2000).
14. T. Pokhil, D. Song, and J. Nowak, *J. Appl. Phys.* **87**, 6319 (2000).
15. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, Москва (1967).
16. W. F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, Wiley, New York (1963).
17. A. Aharoni, *J. Appl. Phys.* **81**, 830 (1997); *ibid.* **87**, 5526 (2000).

On inhomogeneous states for small magnetic particles with exchange anisotropy

B. A. Ivanov, A. Ya. Volk, and A. Yu. Merkulov

An inhomogeneous spin distribution state may occur for a ferromagnetic particle with exchange anisotropy in a magnetic field normal to the easy axis. The existence of inhomogeneous states produces a significant modification of the magnetization—magnetic field dependence of the particle. A comparison between the results obtained and those calculated in the continuous approximation is used to improve the form of boundary conditions in the macroscopic equations of magnetization.