Эффекты четности-нечетности числа атомов в антиферромагнитной атомной цепочке на ферромагнитной подложке

© А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет), Москва, Россия

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 20 мая 2009 г.)

Изучено основное состояние антиферромагнитной цепочки атомов на ферромагнитной подложке с учетом энергии одноионной анизотропии. Продемонстрировано качественно различное поведение цепочек с четным и нечетным числом атомов. Получена фазовая диаграмма в переменных длина цепочки—обменное поле ферромагнетика.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 05-02-19643-НЦНИЛ_а.

1. Введение

Исследование поведения магнитных наноструктур многослойных структур, нанопроволок и т.д. — представляет большой интерес в связи с их обширными применениями. Большое число работ посвящено ферромагнитным нанопроволокам, однако в существенно меньшем числе публикаций рассматривается случай антиферромагнитных нанопроволок. В [1] было численными методами исследовано основное состояние антиферромагнитной цепочки на ферромагнитной подложке и отмечено качественно различное поведение цепочек, состоящих из четного и нечетного числа атомов. Вместе с тем в работе отсутствуют какие-либо аналитические соотношения и не учтен вклад энергии одноионной анизотропии в полную энергию системы. В [2] аналитически была получена критическая длина цепочки с нечетным числом атомов, при которой происходит переход в неколлинеарное состояние в модели, не учитывающей одноионную анизотропию.

Целью настоящей работы является учет одноионной анизотропии, а также демонстрация того факта, что эта задача в упрощенном случае может быть сведена к задаче о спин-флоп- и спин-флип-переходах в тонком антиферромагнитном слое с атомно-гладкими поверхностями.

Главное упрощение, сделанное в работе [1], это то, что спины ферромагнетика предполагаются невозмущенными взаимодействием с антиферромагнитной цепочкой и направленными перпендикулярно поверхности. Это предположение справедливо, если энергия обменного взаимодействия двух спинов в ферромагнетике намного превосходит энергию взаимодействия между соседними спинами, принадлежащими к разным магнетикам. В этом случае, которым мы ограничимся, обменное поле $H_{\rm eff}$, создаваемое ферромагнитной подложкой, можно рассматривать как внешнее для антиферромагнитной цепочки. Будем предполагать, что межатомное расстояние в цепочке совпадает с межатомным расстоянием в подложке, отсчитанным в направлении, параллельном цепочке. Таким образом, атомы антиферромагнетика располагаются над долинами, образованными рядами атомов верхнего слоя ферромагнетика (рис. 1).

Тогда энергия системы классических спинов с учетом энергии одноионной анизотропии имеет вид

$$W = -J \sum_{i=1}^{N-1} (\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_{i+1}) - H_{\text{eff}} \sum_{i=1}^{N} s_i^{(z)} - K \sum_{i=1}^{N} (s_i^{(z)})^2, \quad (1)$$

где N — число атомов в антиферромагнитной цепочке, ось z перпендикулярна поверхности ферромагнетика; первое слагаемое в правой части (1) описывает гейзенберговское обменное взаимодействие ближайших соседей в цепочке, J < 0 — соответствующий обменный интеграл, единичный вектор s_i задает направление *i*-го спина, а его величина включена в соответствующую константу взаимодействия. Второе слагаемое в правой части (1) описывает взаимодействие с подложкой, а последнее — энергию одноионной анизотропии типа "легкая ось", которой в нашем случае K > 0 является ось z.

Все спины антиферромагнитной цепочки параллельны одной и той же плоскости, проходящей через нормаль к поверхности. В случае энергии, задаваемой формулой (1), выбор такой плоскости определяется случайными причинами.



Рис. 1. Антиферромагнитная цепочка атомов на поверхности ферромагнетика. *1* — атомы подложки, *2* — атомы цепочки.

Направление спина в плоскости задается углом θ отклонения от легкой оси *z*.

Минимизируя энергию W по параметрам θ_j , получаем систему уравнений

$$\sin(\theta_j - \theta_{j-1})(1 - \delta_{1,j}) + \sin(\theta_j - \theta_{j+1})(1 - \delta_{N,j})$$
$$= \alpha \sin 2\theta_j + \beta \sin \theta_j, \qquad (2)$$

где

$$\alpha = K/|J| \ll 1, \tag{3}$$

$$\beta = H_{\rm eff} / |J|. \tag{4}$$

В таком упрощенном варианте данная одномерная задача эквивалентна рассмотренной в [3] задаче о спинфлоп- и спин-флип-переходах в тонком слое антиферромагнетика. В этой работе была показана принципиальная разница в поведении слоев с четным и нечетным числом атомных плоскостей (в нашем случае четным и нечетным числом атомов в цепочке). Поэтому рассмотрим эти типы цепочек последовательно.

2. Цепочка с четным числом атомов

В такой цепочке крайние атомы принадлежат разным подрешеткам антиферромагнетика. Как показывает математическое моделирование, в цепочке с четным числом атомов спин-флоп-переход возникает в поле поверхностного спин-флоп-перехода [4–6] β_S

$$\beta_S = \beta_1 / \sqrt{2},\tag{5}$$

где

$$\beta_1 = \sqrt{8\alpha} \tag{6}$$

— поле объемного спин-флоп-перехода [7], в нашем случае это поле спин-флоп-перехода в бесконечной цепочке. В поле, меньшем β_S , цепочка находится в коллинеарной фазе, т.е. спины двух подрешеток параллельны и антипараллельны оси *z* соответственно. В поле $\beta > \beta_S$ в центре цепочки возникает 180° доменная стенка (кривая *I* на рис. 2). Действительно, спины крайних атомов более податливы и стремятся сориентироваться по эфективному полю. Поскольку они принадлежат разным подрешеткам, неизбежно возникновение 180° доменной стенки. В результате спины крайних атомов цепочки оказываются направленными по эффективному полю, создаваемому подложкой.

Толщина возникающей доменной стенки определяется радиусом корреляции антиферромагнитного параметра порядка r_C , который в полях $\beta \sim \beta_1$ описывается формулой [8]:

$$r_C = 2/\sqrt{|\beta^2 - \beta_1^2|},\tag{7}$$

расстояние дано в единицах межатомного расстояния в цепочке.



Рис. 2. Доменные стенки в цепочке с четным числом атомов в полях $\beta_s < \beta < \beta_1$ (1), $\beta \approx \beta_1$ (2), $\beta > \beta_1$ (3). Приведена зависимость углов разворота спинов одной из подрешеток антиферромагнетиков от номера атома.

Если длина цепочки $l < r_C(\beta_S)$, то в цепочке помещается только центральная часть доменной стенки, в которой направление вектора антиферромагнетизма изменяется практически линейно с расстоянием.

По мере роста эффективного поля и приближения β к значению β_1 значение радиуса корреляции расходится корневым образом. При этом в случае $l \gg r_C(\beta_S)$ доменная стенка, расширяясь, захватывает всю толщину слоя в поле β_l , которое можно найти из условия [3]:

$$2r_C(\beta_l) \approx l.$$
 (8)

При дальнейшем росте r_C толщина доменной стенки перестает расти, а вектор антиферромагнетизма разворачивается равномерно на угол π от одного края цепочки к другому так, что спины крайних атомов цепочки направлены по эффективному полю (прямая 2 на рис. 2).

В обменных полях, превосходящих поле β_1 , значение r_C начинает убывать. При этом 180° доменная стенка в центре цепочки преобразуется в две почти 90° доменные стенки на краях цепочки (кривая 3 на рис. 2). В центре цепочки значение для отклонения *i*-го спина от легкой оси θ_i определяется соотношением для бесконечной цепочки

 $\cos\theta_{\infty} = \beta/\beta_2$,

где

$$\beta_2 = 2(2 - \alpha) \approx 4 \tag{10}$$

(9)

есть поле объемного спин-флип-перехода в ферромагнитную фазу. Спины разных подрешеток отклоняются от легкой оси в разные стороны.

Исследуя систему (2), легко показать, что асимптотическое стремление углов $\varphi_i = \theta_i - \theta_\infty$ к нулю описывается формулой [3,8]

$$\varphi_i = \kappa \varphi_{i-1}, \tag{11}$$



Рис. 3. Фазовая диаграмма длина цепочки—обменное поле антиферромагнитной цепочки с четным числом атомов: коллинеарная антиферромагнитная фаза (1), неколлинеарная фаза (2), ферромагнитная фаза (3). Сплошные линии соответствуют линиям фазовых переходов.

где

$$\kappa = \mp \exp(-r_C^{-1}),\tag{12}$$

а радиус корреляции г_С равен

$$r_{C} = -1/\ln\left(\left|1 - \alpha + \frac{\beta^{2}(2 - \alpha)}{\beta_{2}^{2} - 2\beta^{2}}\right| - \sqrt{\left(1 - \alpha + \frac{\beta^{2}(2 - \alpha)}{\beta_{2}^{2} - 2\beta^{2}}\right)^{2} - 1}\right).$$
 (13)

Знаки минус и плюс в правой части формулы (12) соответствуют области полей $\beta_1 \leq \beta \leq \beta^*$ и $\beta > \beta^*$ соответственно. В поле $\beta^* = \beta_2/\sqrt{2}$ значения κ и r_C обращаются в нуль, т.е. отклонение угла скоса от объемного значения имеет место только у крайних спинов цепочки.

При $\beta > \beta^*$ значение r_C начинает расти и расходиться при $\beta \to \beta_2$. В силу конечности цепочки схлопывание подрешеток и переход в ферромагнитную фазу происходят непрерывным образом в поле β_2^* , которое, как показало численное моделирование, можно найти из условия $l \approx 4.5r_C(\beta_2^*)$ [3], что дает

$$\beta_2^* = \beta_2 \left(1 - \frac{2.5}{l^2} \right). \tag{14}$$

Соответствующая фазовая диаграмма приведена на рис. 3.

3. Цепочки с нечетным числом атомов

В этом случае крайние атомы цепочки принадлежат одной подрешетке антиферромагнетика и в полях $\beta \leq \beta_1$ направлены по обменному полю, создаваемому ферро-

магнетиком. Поэтому спин-флоп-переход в ограниченной цепочке будет подавлен и произойдет в магнитном поле $\beta_1^* > \beta_1$, так как спинам крайних атомов цепочки энергетически выгодно оставаться коллинеарными полю.

В поле β_1^* происходит фазовый переход второго рода в спин-флоп-фазу. В отличие от спин-флоп-перехода первого рода в бесконечной цепочке и случая четного числа атомных плоскостей угол разворота спинов меняется с обменным полем непрерывным образом, причем максимум угла разворота имеет место в середине антиферромагнитной цепочки (рис. 4 и 5).

Сдвиг поля спин-флоп-перехода по сравнению со значением β_1 , как показало численное моделирование, можно найти из условия (8), где вместо поля β_l , меньшего β_1 , фигурирует поле β_1^* , превышающее β_1 . Используя формулу (7), получаем

$$(\beta_1^*)^2 = \beta_1^2 + \left(\frac{4}{l}\right)^2.$$
 (15)

Для частного случая $\alpha = \beta_1 = 0$ недавно в работе [2] было получено аналитически значение $\beta_1^* = \pi/l$, близкое нашей аппроксимации.

Поведение цепочки с нечетным числом атомов в полях $\beta \gg \beta_1^*$ аналогично таковому для цепочки с



Рис. 4. Зависимость направления спина центрального атома цепочки из 21 атома от величины обменного поля.



Рис. 5. Углы разворота спинов нечетных атомов в поле $\beta = 0.4$ для цепочки из 41 атома.



Рис. 6. Фазовая диаграмма длина цепочки—обменное поле антиферромагнитной цепочки с нечетным числом атомов: коллинеарная антиферромагнитная фаза (1), неколлинеарная фаза (2), ферромагнитная фаза (3). Сплошные линии соответствуют линиям фазовых переходов.

четным числом атомов. Фазовая диаграмма длина цепочки-обменное поле изображена на рис. 6.

4. Выводы

В заключение сформулируем основные выводы работы.

1) Характер спин-флоп-перехода в антиферромагнитной цепочке на ферромагнитной подложке существенно зависит от четности числа атомов в ней.

2) В цепочке с четным числом атомов спин-флоппереход первого рода происходит в поле поверхностного спин-флоп-перехода. В результате возникает состояние с доменной стенкой, центрированной в середине цепочки.

3) В цепочке с нечетным числом атомов спин-флоппереход второго рода возникает в поле, превышающем поле спин-флоп-перехода в бесконечной цепочке и зависящем от ее длины.

4) Схлопывание подрешеток антиферромагнитной цепочки происходит в поле, меньшем поля спин-флипперехода в бесконечной цепочке и зависящем от ее длины.

Список литературы

- S. Lounis, P.H. Dederichs, S. Blugel. Phys. Rev. Lett. 101, 107 204 (2008).
- [2] P. Politi, M.G. Pini. Phys. Rev. B 79, 012405 (2009).
- [3] А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **47**, 2009 (2005).
- [4] D.L. Mills. Phys. Rev. Lett. 20, 18 (1968).
- [5] D.L. Mills, W.M. Saslow. Phys. Rev. 171, 488 (1968).
- [6] F. Keffer, H. Chow. Phys. Rev. Lett. 31, 1061 (1973).
- [7] L. Neel. Ann. Phys. 5, 232 (1936).
- [8] А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ 47, 1651 (2005).