## К вопросу о формировании заданного распределения осей эффективной анизотропии в ферромагнетиках с регулярными неоднородностями

© А.А. Иванов, В.А. Орлов\*, Г.О. Патрушев\*

Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия \* Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева, Красноярск, Россия E-mail: orlhome@rambler.ru

## (Поступила в Редакцию 21 апреля 2008 г. В окончательной редакции 10 июня 2008 г.)

Исследуется возможность формирования заранее заданного распределения направлений эффективных осей анизотропии магнитных блоков в одномерных нанозернистых структурах с чередующимся направлением локальных осей анизотропии кристаллитов. Получены аналитические выражения для плотности распределения направлений эффективных осей. Показано, что направление осей анизотропии магнитных блоков очень чувствительно к размерам ферромагнитных зерен и степени разориентации локальных осей. Полученные аналитические функции распределения направлений эффективных осей блоков проверены в машинном моделировании.

PACS: 75.30.Gw, 75.50.Tt

Вопросы формирования магнитных материалов с заранее заданными свойствами вызывают большой прикладной и научный интерес. Исследование ультрадисперсных текстурированных магнетиков открывает широкие перспективы в создании материалов с необычными свойствами, характеристиками которых можно управлять на этапе их производства.

В изучении свойств лидерами являются наномагнетики (нанопроволоки, нанопленки и др.). Этот интерес продиктован широкими перспективами использования этих материалов в устройствах со сверхплотной магнитной записью, различного рода датчиках и пр.

Особенными магнитными свойствами обладают структуры с регулярным распределением направлений локальных осей анизотропии (ЛОА) кристаллитов (в том числе и сверхрешетки). Из экспериментальных данных [1,2] следует, что в таких магнетиках конкуренция локальной анизотропии чередующихся слоев (кристаллитов) достигает апогея, и ничтожные флуктуации локальных параметров слоев (формы, размеров, направлений ЛОА и т.д.) катастрофически сказываются на свойствах эффективной магнитной анизотропии.

Как показано в работах [3,4], однородное состояние намагниченности в материалах с конкурирующей анизотропией не является устойчивым. Намагниченность разбивается на крупные магнитные блоки — слабо взаимодействующие области квазиоднородной намагниченности, размер которых значительно превосходит размер доменов в однородном материале и увеличивается по мере уменьшения размеров кристаллитов. В работах [5–7] детально исследовались свойства магнитных блоков: размеры, свойства эффективной анизотропии, спин-переориентационные переходы. Было показано, что магнитный блок обладает анизотропией, параметры которой определяются размерами и свойствами анизотропии кристаллитов, входящих в его состав. Эффективные константы анизотропии блоков и спин-переориентационные переходы в нанокристаллических ферромагнетиках с флуктуациями направлений ЛОА, локальных констант и размеров кристаллитов были исследованы в [6–8]. В настоящей работе нас будет интересовать распределение направлений эффективных осей анизотропии (ЭОА) магнитных блоков и влияние на это распределение других характеристик магнетика: размера неоднородностей и направления ЛОА.

Для аналитического анализа в качестве модели рассмотрим одномерную цепочку ферромагнитных зерен с чередованием в направлении локальных осей анизотропии. Направление ЛОА определяется полярным углом  $\pm \alpha_0$  (ЛОА лежит в одной плоскости). Размеры зерен случайны, а их границы разыгрываются равномерно на ширине блока *L* (рис. 1).

Размеры кристаллита вдоль оси *x* столь малы, что на его протяжении намагниченность не успевает существенно измениться, т. е. выполняется условие  $\langle a \rangle \ll \delta_0$ . Здесь  $\delta_0$  — ширина доменной стенки однородного материала,  $\langle a \rangle = L/N$  — средняя ширина слоя, *N* — количество слоев в блоке. Таким образом, свойства намагниченности блоков определяются влиянием анизотропии большого числа зерен, входящих в этот блок.

Представляет интерес функция распределения направлений эффективных осей анизотропии магнитных блоков. Предварительно рассчитаем среднее число реализаций параметров отдельных слоев, входящих в блок, приводящих к некоторому направлению ЭОА, характеризуемому полярным углом  $\alpha_{\text{eff}}$ . Воспользуемся методом, подробно изложенным в [8]. Вращающий момент поля анизотропии можно представить как сумму вращающих



Рис. 1. Модель нанозернистого регулярного ферромагнетика.

моментов со стороны каждого слоя, входящего в блок. С другой стороны, это момент анизотропии некоторого усредненного однородного участка, совпадающего с размерами блока,

$$\sum_{k} Ka_{k} \sin(2(\alpha_{k} - \vartheta_{0})) = K_{\text{eff}} L \sin(2(\alpha_{\text{eff}} - \vartheta_{0})). \quad (1)$$

После раскрытия скобок в (1) и перегруппировки имеем

$$K_{\text{eff}} L \sin(2\alpha_{\text{eff}}) = \sum_{n} K a_n \sin(2\alpha_n),$$
  
$$K_{\text{eff}} L \cos(2\alpha_{\text{eff}}) = \sum_{n} K a_n \cos(2\alpha_n).$$
 (2)

Поделим в (2) верхнее уравнение на нижнее

$$\tan(2\alpha_{\rm eff}) = \tan(2\alpha_0) \left[ 1 + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{N-1} (-1)^n x_n \right], \qquad (3)$$

где  $x_n$  — координата правой границы *n*-го слоя. Введем для упрощения выкладок следующие обозначения:  $\tau = \tan(2\alpha_{\text{eff}}), \tau_0 = \tan(2\alpha_0)$ . В данном случае  $\tau$  является случайной величиной.

Далее будем искать среднее число конфигураций локального поля анизотропии, приводящих к определенному значению  $\tau$ , которое обозначим как  $P(\tau)$ .

Элементарная вероятность того, что параметр  $\tau$  примет какое-либо значение из интервала  $d\tau$ , выглядит следующим образом:

$$dP = \prod_{n=1}^{N-1} \rho(x_n) \delta(\tau - \tau_0) dx_1 dx_2 \dots dx_n d\tau.$$
 (4)

Здесь  $\rho(x_n)$  — плотность распределения координаты правой границы *n*-го кристаллита. Функция Дирака исключает реализации, не удовлетворяющие условию (3). Полная вероятность определяется интегрированием (4) по всем значениям координат.

При равномерном распределении координат границ слоев для  $\rho(x_n)$  имеем

$$\rho(x_n) = \frac{N-1}{L} J_n.$$
(5)

Здесь

$$J_n = \begin{cases} 1: & 0 < x_n < x_{n+1}, \\ 0: & x_n > x_{n+1}. \end{cases}$$

Согласно определению "среднего",

$$P(\tau) = \iint_{\tau}^{L} \dots \iint_{0}^{L} \delta\left(\tau - \tau_{0} - \tau_{0} \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{N-1} (-1)^{n} x_{n}\right)$$
$$\times \prod_{n=1}^{N-1} \rho(x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n} d\tau.$$
(6)

С учетом (5) выражение (6) перепишется в более простом виде

$$P(\tau) = \left(\frac{N-1}{L}\right)^{N-1} \iint_{\tau}^{L} \dots \iint_{0}^{x_{2}} \delta\left(\tau - \tau_{0} - \tau_{0} \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{N-1} (-1)^{n} x_{n}\right) \prod_{n=1}^{N-1} \rho(x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n} d\tau.$$
(7)

Выражение (7) представляет собой свертку. Разложив  $P(\tau)$  в непрерывный ряд Фурье, после простых преобразований получим свертку в *k*-пространстве

$$\Omega(k) = \left(\frac{N-1}{L}\right)^{N-1} \exp(-ik)I_N, \qquad (8)$$

где введено обозначение

$$I_{N} = \int_{0}^{L} \dots \int_{0}^{x_{2}} \exp\left(-\frac{2ik}{L} \sum_{n=1}^{N-1} (-1)^{n} x_{n}\right) \times dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n} \dots dx_{N-1}.$$
 (9)

Дальнейшее вычисление Фурье-образа распределения эффективных осей сводится к интегрированию выражения (9) с учетом количества кристаллитов в одном блоке N. Вычисление (9) для некоторых значений N (2, 3, 4...) позволило угадать общее выражение для плотности распределения тангенсов ЭОА

$$P(\tau) = \rho_0 \, \frac{(\tau^2 - \tau_0^2)^{\frac{N}{2} - 1}}{\tau_0^{N-1}},\tag{10}$$

*ρ*<sub>0</sub> — коэффициент, определяемый из условия нормировки. В результате для функции распределения тангенсов эффективной оси анизотропии получим

$$P(\tau) = \frac{\prod_{n=1}^{N/2} (2n-1)}{2^{N/2} (\frac{N}{2} - 1)!} \frac{(\tau^2 - \tau_0^2)^{\frac{N}{2} - 1}}{\tau_0^{N-1}}.$$
 (11)

**Рис. 2.** Функция распределения направлений эффективности оси анизотропии блока для  $\alpha_0 \pm \pi/5$  при разном количестве слоев в блоке. N = 200 (*I*), 20 (*2*), 10 (*3*), 8 (*4*), 4 (*5*), 2 (*6*).

Для функции распределения полярных углов  $\alpha_{\rm eff}$ 

N7 /0

$$P(\alpha_{\rm eff}) = \frac{\prod_{n=1}^{N/2} (2n-1)}{2^{\frac{N}{2}-1} (\frac{N}{2}-1)!} \frac{\left(\tan^2(\alpha_0) - \tan^2(\alpha_{\rm eff})\right)^{\frac{N}{2}-1}}{\tan^{N-1}(\alpha_0)\cos^2(\alpha_{\rm eff})}.$$
 (12)

На рис. 2 приведены графики, построенные по выражению (12) для разного количества слоев в одном блоке *N*. Параметр *N* определяется толщиной слоев, входящих в магнетик [5,6]. Таким образом, мультислойные структуры одного химического состава, но с разной толщиной слоев могут иметь разные преимущественные направления ЭОА блоков по отношению к направлению ЛОА. В случае массивного образца, когда в магнетике много блоков, можно, варьируя размер неоднородностей, добиться как одноосной, так и двухосной магнитной анизотропии блоков.

Характерное значение *N*, при котором максимум функции распределения ЭОА уже не совпадает со средним направлением анизотропии слоев, а смещается к направлению ЛОА, можно вычислить из выражения

$$\frac{\partial^2 P(\alpha_{\rm eff})}{\partial \alpha_{\rm eff}^2} = 0 \tag{13}$$

где  $\alpha_{\rm eff} = 0$ .

В результате получим

$$N_{\rm trans} = \frac{2}{\cos^2(2\alpha_{\rm eff})}.$$
 (14)

Итак, в слоистой чередующейся структуре преимущественное положение эффективной оси анизотропии магнитного блока  $\alpha_{eff}$  зависит от степени разориентации локальных осей анизотропии неоднородностей и про-

Большее количество кристаллитов, входящих в блок, обеспечивает меньшую дисперсию в разбросе размеров самих кристаллитов, а значит, усиливается эффект компенсации вращающих моментов со стороны поля анизотропии соседних слоев [8]. Суть эффекта компенсации состоит в следующем. Два тонких кристаллита разной толщины с разориентацией ЛОА, близкой к 90°, конкурируют, пытаясь притянуть намагниченность к направлению собственной ЛОА. При одинаковой толщине компенсация была бы полной, и пара стала бы изотропной. При разных толщинах преимущество получает более широкий слой. Своей частью (равной толщине узкого слоя) он компенсирует анизотропию тонкого слоя. Оставшаяся часть и определяет анизотропию пары. Очевидно, что направление эффективной анизотропии пары близко к направлению ЛОА широкого слоя. Этот эффект тем более выражен, чем больше различие в толщинах слоев и чем ближе разориентация их ЛОА к прямому углу.

Заметим, что в этих рассуждениях мы не упомянули об эффекте "тонкой подстройки" намагниченности под анизотропию кристаллита. Как показано в [9,10], в случае  $\alpha_0 \approx \pm \pi/4$  подстройка намагниченности под направление локальной оси анизотропии ответственна за возникновение эффективной двухосной анизотропии. При этом эффективные оси анизотропии имеют направления  $\alpha_{\text{eff}} = 0, \pi/2$ . Эффективная константа анизотропии блока в таком магнетике определяется выражением (K — локальная константа анизотропии)

$$K_{\rm eff} = \frac{1}{48} \, K b^2.$$
 (15)

Можно оценить значение разворота углов  $\alpha_0$ , при котором тонкая подстройка намагниченности под анизотропию кристаллита становится существенной. Для этого запишем плотность энергии магнитной анизотропии пары одинаковых кристаллитов с разориентацией ЛОА  $\pm \alpha_0$  (рис. 3)

$$E = K\cos(2\alpha_0)\sin^2(\vartheta), \qquad (16)$$

где  $\vartheta$  — полярный угол намагниченности.

Коэффициент перед  $\sin^2(\vartheta)$  есть эффективная константа этой пары. Приравняем ее к константе пары кристаллитов (15) для модели из [19] ( $\alpha = \pm \pi/4$ ).

В результате получим значение угла  $\alpha_0$ , при котором в случае небольшого разброса размеров кристаллитов тонкой подстройкой намагниченности уже нельзя пренебрегать

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{b^2}{48}\right). \tag{17}$$

Заметим, что этот критический угол тем ближе к  $\pm \pi/4$ , чем мельче кристаллиты или больше размер магнитного блока. Кроме того, степень влияния подстройки еще уменьшится, если размеры кристаллитов будут флуктуировать.





**Рис. 3.** Локальные оси анизотропии и намагниченность пары кристаллитов. **m** — вектор намагниченности пары соседних кристаллитов с разориентацией направлений локальных осей анизотропии  $\pm \alpha_0$ .

 $P(\alpha_{eff})$ 

**Рис. 4.** Функция распределения направлений эффективной оси анизотропии блока для  $\alpha_0 = \pm \pi/5$  при разном количестве слоев в блоке по результатам численного моделирования. N = 150 (1), 60 (2), 50 (3), 40 (4), 30 (5), 20 (6), 10 (7).

Для проверки теоретических результатов мы провели численное моделирование регулярного магнетика. Методом градиентного спуска решалась система уравнений для равновесного положения намагниченности, полученная после поэтапной минимизации полной энергии магнетика

$$W = \sum_{n=1}^{N} E_n, \qquad (18)$$

$$E_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \left( A\left(\frac{d\vartheta}{dx}\right)^2 + K\sin^2\left((-1)^n\alpha_0 - \vartheta\right) \right) dx.$$
(19)

Здесь *А* — постоянная обмена, *x<sub>n</sub>* и *x<sub>n+1</sub>* — координаты левой и правой границы *n*-го слоя.

На первом этапе производится поиск равновесного распределения намагниченности из минимизации (19)

на ширине одного кристаллита как функции углов намагниченности на краях кристаллита. Получив это распределение, выписываем полную энергию магнетика через эти граничные углы. На втором этапе производим минимизацию полной энергии (18) по граничным углам. В результате имеем систему вида

$$\frac{\vartheta_{n+1}-\vartheta_n}{x_{n+1}-x_n} - \frac{\vartheta_n-\vartheta_{n-1}}{x_n-x_{n-1}} = -\frac{1}{4\delta_0^2} ((x_{n+1}-x_n) \times \sin(2\alpha_n-2\vartheta_n) + (x_n-x_{n-1})\sin(2\alpha_{n-1}-2\vartheta_{n-1})).$$
(20)

Здесь  $\delta_0^2 = 1/K$ .

В моделировании границы кристаллитов разыгрывались равномерно на ширине блока L (таким образом, размеры кристаллитов распределены по закону Пуассона). Затем производился поиск равновесного значения углов ( $\vartheta_1, \vartheta_2, \ldots, \vartheta_n, \ldots$ ). В работе [5] показано, что направление эффективной оси практически совпадает с положением намагниченности блока. Поэтому среднее значение найденных граничных углов принимаем за направление ЭОА.

Таким способом производился поиск устойчивых конфигураций намагниченности большого числа реализаций и собиралась статистика в направлении намагниченности. Результаты приведены на рис. 4. Очевидно, что моделирование качественно подтверждает аналитическое выражение (12).

Таким образом, мы проанализировали влияние размеров кристаллитов и разориентации локальных осей неоднородностей на закон распределения направлений эффективных осей анизотропии магнитных блоков. Показано, что в зависимости от размера кристаллитов эффективная анизотропия блока может иметь как одноосную, так и двухосную симметрию.

Проведена оценка критического значения угла разворотов ЛОА, при котором флуктуации намагниченности внутри на протяжении одного кристаллита могут оказывать сущестенное влияние на направления эффективных осей.

Результаты проверены и подтверждены в численном моделировании методом градиентного спуска.

## Список литературы

- В.Н. Самофалов, Л.З. Лубяный, Л.И. Лукашенко, Н.Е. Оверко, А.В. Лукашенко. ФММ 80, 67 (1995).
- [2] В.О. Васьковский, В.Н. Лепаловский, Г.А. Галицкий. ФММ 82, 83 (1996).
- [3] В.А. Игнатченко. ЖЭТФ 54, 303 (1968).
- [4] Y. Ymry, S.-K. Ma. Phys. Rev. Lett. 35, 1399 (1975).
- [5] А.А. Иванов, Г.О. Патрушев. ФММ 84, 35 (1997).
- [6] А.А. Иванов, В.А. Орлов, Г.О. Патрушев. ФММ 84, 47 (1997).
- [7] А.С. Лилеев, С.А. Мельников, В.П. Менушенков, В.А. Сеин. Изв. АН СССР. Металлы **5**, 165 (1988).
- [8] А.А. Иванов, В.А. Орлов, Г.О. Патрушев. ФММ 103, 1 (2007).
- [9] А.А. Иванов, В.А. Орлов. ФММ 84, 43 (1997).
- [10] П.П. Дьячук, Е.В. Лариков. ФТТ 37, 3735 (1995).