

Магнитная фазовая диаграмма двухслойной системы ферромагнетик–антиферромагнетик с шероховатой границей раздела

© А.И. Морозов

Joint European Laboratory LEMAC

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет),
119454 Москва, Россия

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 14 сентября 2007 г.)

Исследована фазовая диаграмма толщина–шероховатость тонкой пленки ферромагнетика на антиферромагнитной подложке в условиях, когда шероховатость границы раздела слоев ведет к фрустрации обменного взаимодействия между ними. Показано, что учет одноионной анизотропии ведет к существенному усложнению фазовой диаграммы по сравнению с таковой, полученной в рамках обменного приближения. Прослежена эволюция доменных стенок нового типа, порождаемых фрустрациями, с ростом толщины пленки и ширины атомных ступеней на границе раздела пленка–подложка.

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

PACS: 75.70.-i, 75.70.Rf, 75.50.Ee, 75.30.Kz, 75.60.Ch

1. Введение

Многослойные системы ферромагнетик–антиферромагнетик находят широкое применение в сенсорах магнитного поля, считывающих головках жестких дисков и магниторезистивной памяти. Поэтому исследование их свойств наряду с фундаментальным представляет и значительный прикладной интерес.

В настоящей работе мы исследуем фазовую диаграмму пленки ферромагнетика на толстой антиферромагнитной подложке. Эта задача полностью эквивалентна задаче о тонкой пленке антиферромагнетика на ферромагнитной подложке. Будем предполагать, что кристаллические решетки слоев слабо различаются и являются продолжением друг друга. В этом случае основными геометрическими параметрами являются толщина пленки a и характерное расстояние R между краями атомных ступеней на границе раздела пленка–подложка.

Если атомные плоскости коллинеарного двухподрешеточного антиферромагнетика, параллельные границе раздела, являются некомпенсированными, то наличие атомных ступеней на границе раздела ведет к фрустрации гейзенберговского обменного взаимодействия между ближайшими спинами, принадлежащими к соседним слоям (см., например, обзор [1]). Действительно, по разные стороны ступени спины ферромагнетика граничат со спинами, принадлежащими разным подрешеткам антиферромагнетика (рис. 1). При любом знаке обменного интеграла $J_{f,af}$ между соседними спинами, принадлежащими различным слоям, по одну сторону ступени коллинеарная ориентация ферромагнитного и антиферромагнитного параметров порядка отвечает минимуму обменной энергии границы раздела, а по другую сторону ступени граничная энергия максимальна. Налицо фрустрация, порожденная атомной ступенью. Таким образом, атомные ступени разбивают границу

раздела на области двух типов: в областях первого типа энергетически выгодной является параллельная ориентация ферро- и антиферромагнитного параметров порядка, а в областях второго типа — антипараллельная.

В обменном приближении такая фрустрированная система рассмотрена нами в работах [2,3], была найдена ее фазовая диаграмма и показано, что в случае достаточно больших R фрустрации ведут к разбиению пленки на 180° домены доменными стенками нового типа. Такая стенка перпендикулярна плоскости пленки и совпадает с краем атомной ступени на границе раздела, а ее толщина определяется соотношением обменных взаимодействий в слоях и между слоями. Поэтому при толщине пленки в 1–10 nm толщины доменных стенок имеют тот же порядок величины. Не так давно эти доменные стенки нового типа были обнаружены экспериментально [4,5].

Обменное приближение соответствует случаю, когда ширина атомных ступеней R намного меньше толщин традиционных доменных стенок в ферро- и антифер-

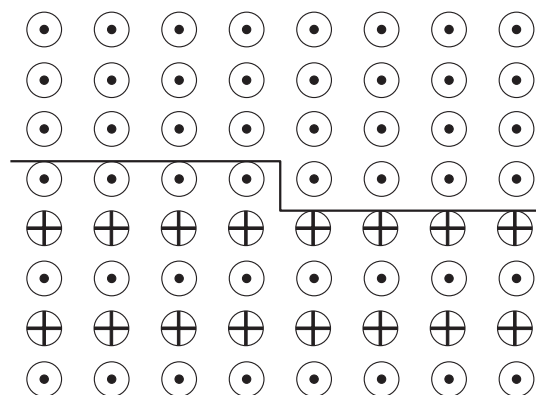


Рис. 1. Атомная ступень на границе раздела ферромагнетик–антиферромагнетик.

ромагнетике, определяемых соотношением обменной энергии и энергии анизотропии. Достижения современной технологии, связанные с получением пленок и многослойных структур с большой шириной атомных ступеней на границах раздела, делают актуальным выход за рамки обменного приближения, т.е. учет энергии анизотропии. Этому исследованию и посвящена настоящая работа.

2. Описание модели

Рассмотрим двухслойную структуру ферромагнетик–антиферромагнетик при температурах $T \ll T_C, T_N$ (T_C — температура Кюри ферромагнетика, а T_N — температура Нееля антиферромагнетика), когда модули магнитных моментов атомов можно считать неизменными. Ограничимся рассмотрением локализованных квазиклассических спинов в приближении гейзенберговского обменного взаимодействия между ближайшими соседями. Направление локализованного спина будем задавать единичным вектором \mathbf{s}_i , а его величину включим в соответствующую константу взаимодействия. Тогда энергия обменного взаимодействия ближайших соседей принимает вид

$$W_{ij}^{ex} = -J_{ij}(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j), \quad (1)$$

где обменный интеграл J_{ij} принимает в ферромагнетике значение $J_f > 0$, в антиферромагнетике — значение $J_{af} < 0$, на границе раздела — значение $J_{f,af}$ (для определенности мы выбрали его положительным). Будем предполагать, что $J_{f,af}$ и минимальный по модулю из обменных интегралов J_f, J_{af} одного порядка величины. В этом случае ширина области вблизи края атомной ступени на границе пленка–подложка, в которой относительная ориентация спинов ферро- и антиферромагнетика существенно отличается от параллельной, порядка межатомного расстояния [1–3]. При этом область слабых искажений магнитных параметров порядка на фазовой диаграмме отсутствует.

Пусть поверхность пленки соответствует срезу (100) тетрагональной объемно центрированной решетки с осью легкого намагничивания c , лежащей в плоскости пленки.

Введем декартову ортогональную систему координат с осями, параллельными кристаллографическим, причем ось x параллельна „легким“ осям слоев, а ось z направлена наружу перпендикулярно пленке. Для уменьшения числа параметров будем предполагать, что энергии одноионной анизотропии одинаковы в обоих слоях и имеют вид

$$W_{an} = K_{\perp} \sum_{i \in f} (s_i^{(z)})^2 - K_{\parallel} \sum_i (s_i^{(x)})^2, \quad (2)$$

где K_{\parallel} — константа одноосной анизотропии, K_{\perp} — константа поверхностной анизотропии ферромагнетика, введенная для того, чтобы учесть энергетическую невыгодность состояний, в которых намагниченность имеет

z -составляющую, перпендикулярную поверхности. Прямой учет диполь-дипольного взаимодействия спинов и возникающих размагничивающих полей кардинально усложняет задачу и резко увеличивает время расчета.

Для нахождения равновесного распределения спинов проводилось моделирование их поведения на основе системы уравнений Ландау–Лифшица–Гильберта

$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{s}_i = [\mathbf{s}_i, \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \mu \mathbf{H}_{\text{eff}}, \quad (3)$$

где μ — затухание,

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}^p = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{s}_i^p}, \quad (4)$$

$p = x, y, z$; W — суммарная энергия обмена и анизотропии.

Решение системы уравнений (3) находилось „классическим“ методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Приход к равновесию контролировался по поведению суммарной энергии системы. Моделирование проводилось для случая, когда края атомных ступеней на границе пленка–подложка параллельны оси z ортогональной системы координат, т.е. решалась двумерная задача с периодическими по x граничными условиями. Последнее предположение не влияет качественно на полученную фазовую диаграмму толщина пленки–шероховатость.

3. Результаты моделирования

1) Исследуем сначала случай $|J_{af}| \gg J_f$, когда энергия обменного взаимодействия в пленке существенно ниже, чем в подложке. При этом в отсутствие магнитного поля искажения антиферромагнитного параметра порядка слабы, и его можно считать однородным и направленным вдоль „легкой“ оси.

Вид искажений ферромагнитного параметра порядка зависит от соотношения толщины пленки и ширины

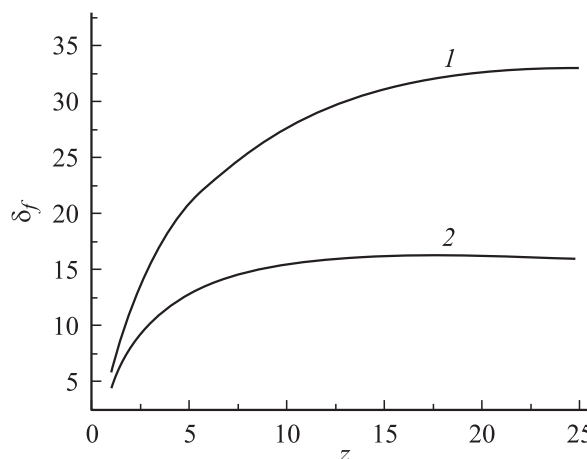


Рис. 2. Зависимость толщины доменной стенки нового типа в ферромагнетике от расстояния до границы раздела для случаев $\Delta_f > a$ (1) и $\Delta_f < a$ (2). Все расстояния даны в единицах соответствующих постоянных кристаллической решетки.

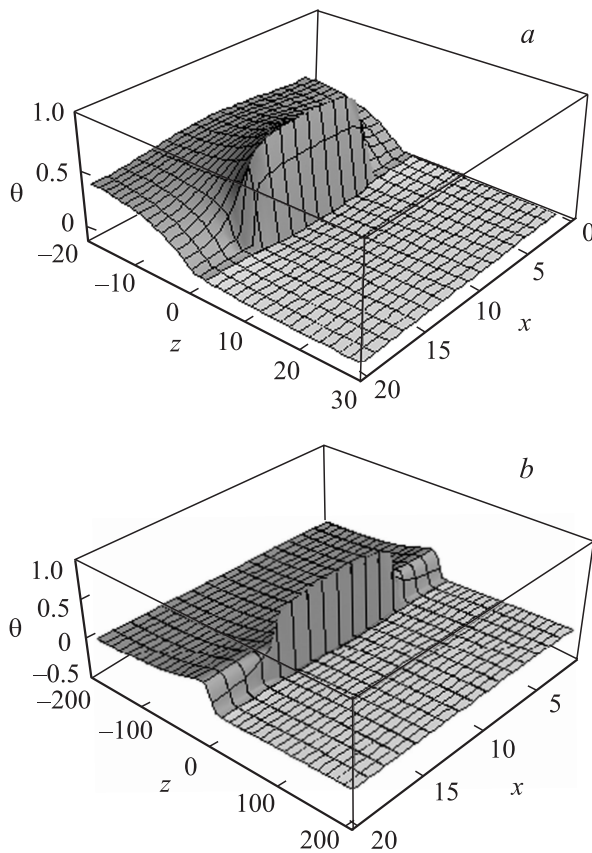


Рис. 3. Статические спиновые вихри в тонкой (а) и толстой (б) пленках ферромагнетика при $|J_{af}| = 10J_f$ и $K_{\parallel} = 5 \cdot 10^{-4}J_f$. Пленке соответствует область отрицательных, а подложке — положительных значений z , атомные ступени расположены при $x = 5$ и 15 . Угол θ описывает разворот соответствующего параметра порядка в плоскости пленки относительно „легкой“ оси.

ступеней на границе пленка–подложка. При $R \gg a$, как уже упоминалось, пленка разбивается на 180° домены доменными стенками нового типа так, чтобы взаимная ориентация ферро- и антиферромагнитного параметров порядка в каждом домене (параллельная или антипараллельная) отвечала минимуму граничной энергии. Толщина этих стенок растет пропорционально расстоянию от границы раздела (рис. 2). Это справедливо вплоть до момента, когда толщина стенки сравнивается по порядку величины с толщиной традиционной доменной стенки $\Delta_f \sim b(J_f/K_{\parallel})^{1/2}$, где b — постоянная решетки. После этого вследствие вклада энергии анизотропии толщина стенки выходит на постоянное значение (рис. 2). Тип традиционной доменной стенки (блховская, неелевская или гибридная) зависит от ориентации края атомной ступени относительно оси легкого намагничивания. Но поскольку характерные поверхностные энергии $\varepsilon_f \sim (J_f K_{\parallel})^{1/2}/b^2$, а также толщины традиционных доменных стенок одного порядка величины (см., например, [6]), в дальнейшем будем употреблять термин „традиционная доменная стенка“.

Если же $R \ll a$, то вблизи границы с подложкой в пленке возникают статические спиновые вихри (рис. 3, а), края которых на границе раздела совпадают с краями ступеней, а размер в направлении, перпендикулярном границе, такой же, как минимальный размер вихря в плоскости раздела слоев. При $R \ll a \ll \Delta_f$ для уменьшения энергии вихрей ферромагнитный параметр порядка вдали от границы раздела ориентируется перпендикулярно антиферромагнитному параметру порядка в подложке, т.е. вектор намагниченности пленки направлен вдоль „трудной“ оси. Действительно, как уже отмечалось, ступени разбивают всю поверхность раздела на области двух типов с суммарными площадями σ_1 и σ_2 соответственно. Если средняя намагниченность ферромагнитной пленки составляет угол ψ с антиферромагнитным параметром порядка в подложке, то в вихре, занимающем область первого типа, происходит разворот намагниченности в плоскости пленки на угол ψ , в то время как в вихрях, занимающих области второго типа, намагниченность разворачивается в противоположную сторону на угол $\pi - \psi$.

По аналогии с моделью „магнитной близости“ Слончевского [7] энергия системы может быть представлена выражением

$$W = C_1 \psi^2 + C_2 (\pi - \psi)^2, \quad (5)$$

где, согласно [1,3],

$$C_j \equiv C \sigma_j \approx \frac{\min(J_f, |J_{af}|) \sigma_j}{Rb}. \quad (6)$$

Если $\sigma_1 = \sigma_2$, то в нулевом магнитном поле намагниченность пленки в равновесии должна быть перпендикулярна антиферромагнитному параметру порядка. При этом вращение вектора намагниченности в каждом вихре происходит на угол $\pi/2$, отличаясь направлением вращения в областях разного типа.

Если же $R \ll \Delta_f \ll a$, то вблизи границы раздела в пленке возникает почти 90° блховская доменная стенка — так, чтобы вблизи границы раздела ферро- и антиферромагнитные параметры порядка были взаимно перпендикулярны, а вдали от нее были практически параллельны „легкой“ оси (рис. 3, б).¹ При конечной толщине пленки вдали от границы раздела намагниченность отклоняется от „легкой“ оси на угол φ_f , который можно найти из следующих соображений. Угол разворота намагниченности в доменной стенке равен $\pi/2 - \varphi_f$, а ее поверхностная энергия при $\varphi_f \ll 1$ равна

$$\varepsilon_f = \varepsilon_f^{(0)} \left[1 - \frac{2\varphi_f}{\pi} \right], \quad (7)$$

где $\varepsilon_f^{(0)}$ — поверхностная энергия 90° блховской доменной стенки.

¹ Если (как в случае кубической кристаллической решетки) в плоскости пленки существуют две взаимно перпендикулярные „легкие“ оси, то доменная стенка не возникает, а ферро- и антиферромагнитные параметры порядка ориентированы взаимно перпендикулярно.

Проигрыш в энергии анизотропии из-за отворота намагниченности от „легкой“ оси в расчете на единицу площади пленки составляет

$$K_{\parallel} a (1 - \cos \varphi_f) / V_0, \quad (8)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки. Величина φ_f находится из условия минимума суммы выражений (7) и (8)

$$\varphi_f \sim \frac{\Delta_f}{a} \ll 1. \quad (9)$$

Подчеркнем еще раз, что при $a \ll \Delta_f$ значение φ_f близко к $\pi/2$.

В случае $\Delta_f \ll R \ll a$ вместо полукруглых статических спиновых вихрей вблизи границы с подложкой в областях одного типа (для определенности второго) в пленке возникают параллельные границе раздела почти 180° доменные стенки следующего вида: на расстоянии порядка Δ_f от краев атомных ступеней, ограничивающих данную область, толщина доменной стенки возрастает от межатомного расстояния до величины порядка Δ_f , а на остальной площади области стенка представляет собой традиционную блоховскую доменную стенку (рис. 4). В областях первого типа намагниченность ферромагнетика остается однородной, в объеме пленки она параллельна антиферромагнитному параметру порядка. Если доменные стенки возникают в областях первого типа, то в областях второго типа намагниченность ферромагнетика остается однородной, в объеме пленки она антипараллельна антиферромагнитному параметру порядка.²

Обсудим теперь поведение системы при $R \sim a$. В области $\Delta_f \gg R, a$ переход пленки от полидоменного состояния к монодоменному состоянию с вихрями по мере уменьшения R (при росте степени шероховатости) происходит непрерывно за счет перекрытия доменных стенок [1,3]. При $\Delta_f \ll R, a$ имеет место фазовый переход первого рода между этими фазами. Таким образом, при $R \sim a \sim \Delta_f$ на фазовой диаграмме толщина пленки–шероховатость существует критическая точка (рис. 5). В реальной пленке фазовый переход размывается за счет разброса по ширинам атомных ступеней на границе раздела.

Вдали от критической точки ($R \gg \Delta_f$), когда переходная область вблизи края ступени вносит малый вклад в энергию доменной стенки, значение R_c , соответствующее точке фазового перехода при заданной толщине пленки, легко найти из следующих соображений. Энергия поперечных доменных стенок в полидоменной фазе в расчете на единицу площади пленки равна $\nu \varepsilon_f a / R$,

² В случае кубической симметрии 90° доменные стенки с аналогичной структурой возникают в областях обоих типов, причем разворот намагниченности в областях разного типа происходит в противоположном направлении. В объеме пленки намагниченность ориентирована перпендикулярно антиферромагнитному параметру порядка в подложке.

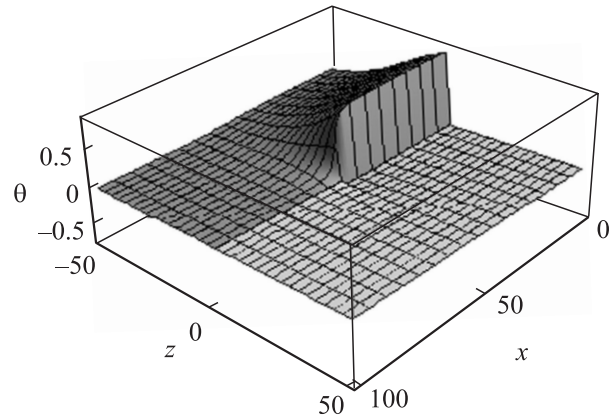


Рис. 4. Доменная граница, параллельная границе раздела, в области второго типа. Атомная ступень расположена при $x = 50$. Остальные обозначения те же, что на рис. 3.

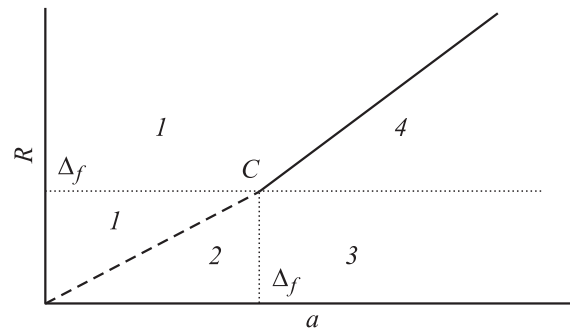


Рис. 5. Фазовая диаграмма толщина пленки–шероховатость в случае, когда энергия обменного взаимодействия в пленке существенно ниже, чем в подложке. 1 — полидоменная фаза, 2 — фаза с вихрями и намагниченностью пленки, ориентированной перпендикулярно „легкой оси“, 3 — фаза с вихрями и 90° блоховской доменной стенкой, 4 — фаза со 180° блоховскими доменными стенками, параллельными границе раздела, в областях одного типа. Сплошная линия соответствует линии фазовых переходов первого рода, C — критическая точка.

где $\nu \sim 1$ ($\nu = 1$ для параллельных краев ступеней и $\nu = 2$ для квадратной сетки краев ступеней). Энергия параллельных границе раздела доменных стенок в ферромагнетике в монодоменной фазе в расчете на единицу площади пленки равна $0.5 \varepsilon_f$ (множитель 0.5 возникает из-за того, что стенки существуют только в областях одного типа). Приравнявая эти энергии, находим

$$R_c = 2\nu a. \quad (10)$$

При $R > R_c$ пленка находится в полидоменном состоянии, а при $R < R_c$ — в монодоменном состоянии с доменными стенками на границе раздела.³

³ В случае кубической решетки ситуация аналогична, но при переходе в полидоменную фазу в каждом домене ферромагнитный параметр порядка совершает разворот на 90° , чтобы стать параллельным или антипараллельным антиферромагнитному параметру порядка.

2) Перейдем к рассмотрению случая, когда энергия обменного взаимодействия в пленке существенно выше, чем в подложке ($|J_{af}| \ll J_f$), и вследствие фрустрации в подложке возникают сильные искажения антиферромагнитного параметра порядка [1,3].

Введем безразмерный параметр $\gamma = J_f/|J_{af}|$. Поскольку поверхностная энергия традиционной доменной стенки в антиферромагнетике ε_{af} и ее толщина Δ_{af} задаются полностью аналогично случаю доменной стенки в ферромагнетике, отношение поверхностных энергий доменных стенок в пленке и подложке, а также их толщин составляет

$$\frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_{af}} = \frac{\Delta_f}{\Delta_{af}} = \sqrt{\gamma}. \quad (11)$$

В области толщин $\gamma a < \Delta_{af}$ уединенная доменная стенка, порожденная фрустрацией в двухслойной системе, имеет вид, изображенный на рис. 6, *a* [1,3]. Ширина ее в ферромагнетике равна $\delta_f \sim \gamma a$. В подложке имеют место искажения параметра порядка, захватывающие область радиусом порядка δ_f вокруг края ступени. Именно эти искажения вносят основной вклад в энергию доменной стенки.

По мере роста толщины пленки γa превосходит Δ_{af} . При этом искажения антиферромагнитного параметра порядка на расстоянии от края ступени, превосходящем Δ_{af} , приобретают вид традиционной доменной стенки, параллельной границе раздела (рис. 6, *b*). Оценим толщину δ_f доменной стенки в ферромагнетике, предполагая, что $\delta_f \ll \Delta_f$. Это можно сделать из простых энергетических соображений. Энергия доменной стенки (в расчете на одну постоянную решетки вдоль края ступени) складывается из энергии искажений ферромагнитного параметра порядка в пленке $\sim J_f a / \delta_f$ и энергии искажений антиферромагнитного параметра порядка в подложке $\sim [|J_{af}| \ln(\Delta_{af}/b) + b(\delta_f - \Delta_{af})\varepsilon_{af}]$. Минимизируя ее по параметру δ_f , находим

$$\delta_f \sim \left(\frac{J_f a}{b \varepsilon_{af}} \right)^{1/2} \sim (\gamma a \Delta_{af})^{1/2} \propto a^{1/2}. \quad (12)$$

Условие $\delta_f < \Delta_f$ эквивалентно при наших допущениях условию $a < \Delta_{af}$. При больших толщинах пленки величина δ_f равна Δ_f .

Исследуем теперь фазовую диаграмму толщина пленки–шероховатость. Если в области $R < \Delta_f$ параметр R превосходит толщину доменной стенки δ_f , то пленка оказывается разбитой на домены стенками нового типа, перпендикулярными плоскости пленки и совпадающими с краями атомных ступеней на границе пленка–подложка.

По мере уменьшения R стенки начинают перекрывать, и система непрерывным образом переходит в состояние, в котором пленка является практически монодоменой, а в подложке вблизи границы раздела имеют место

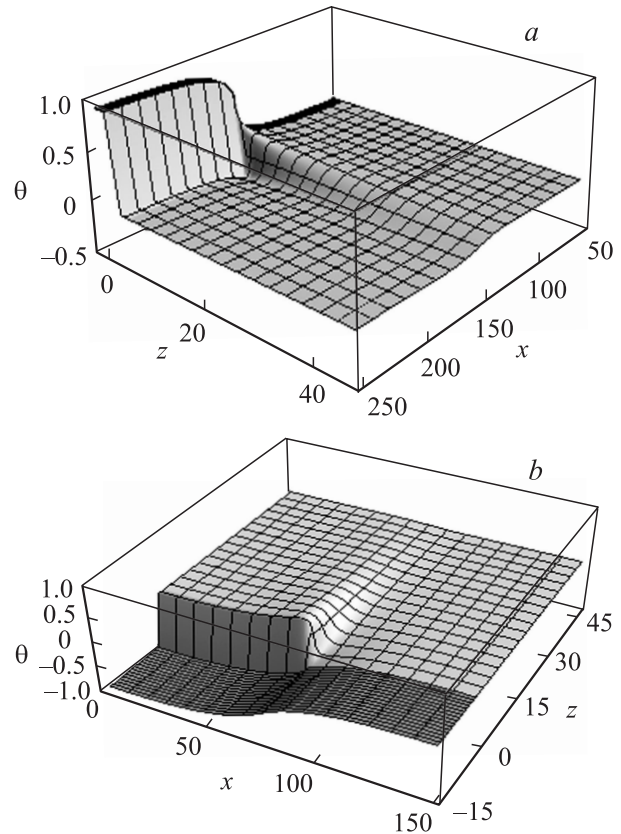


Рис. 6. Доменная стенка нового типа, перпендикулярная границе раздела, при $\gamma = 10$ в случаях $\delta_f < \Delta_{af}$ (*a*) и $\delta_f > \Delta_{af}$ (*b*). Атомная ступень расположена при $x = 150$ (*a*) и 75 (*b*). Остальные обозначения те же, что на рис. 3.

сильные искажения антиферромагнитного параметра порядка [1,3]. В области значений $R \ll \Delta_{af}$ это полукруглые статические 90° вихри. При $\Delta_{af} \ll R \ll \delta_f < \Delta_f$ они приобретают сплюснутую форму, их размер в перпендикулярном направлении равен Δ_{af} и меньше продольного размера R . Следует отметить, что для всех значений толщины пленки $a \ll \Delta_{af}$ ее намагниченность остается направленной перпендикулярно „легкой оси“.

Если $a \gg \Delta_{af}$, то при $R \ll \Delta_{af}$ наряду с полукруглыми статическими 90° вихрями в подложке вблизи границы раздела формируется почти 90° блоховская доменная стенка. Направление намагниченности определяется формулой (9), в которой Δ_f следует заменить на Δ_{af} . Ситуация аналогична картине, изображенной на рис. 3, *b*, но искажения параметра порядка переместились из пленки в подложку.

При $a \gg \Delta_{af}$ и $\Delta_{af} \ll R \ll R_c$ вместо полукруглых вихрей в областях одного типа в подложке возникают параллельные границе раздела почти 180° доменные стенки, а в областях другого типа антиферромагнитный параметр порядка остается однородным. Картина аналогична изображенной на рис. 4 (только пленка и подложка поменялись местами).

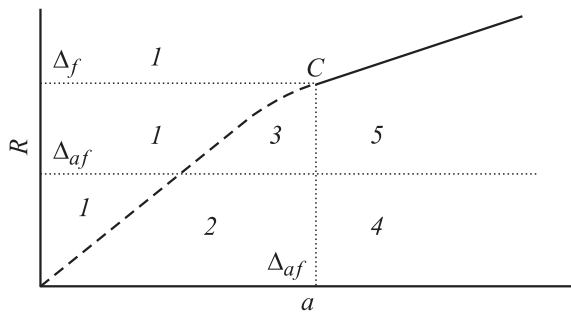


Рис. 7. Фазовая диаграмма толщина пленки–шероховатость в случае, когда энергия обменного взаимодействия в пленке существенно выше, чем в подложке. 1 — полидоменная фаза, 2 — фаза с полукруглыми вихрями и намагниченностью пленки, ориентированной перпендикулярно „легкой“ оси, 3 — фаза со сплюснутыми вихрями и намагниченностью пленки, ориентированной перпендикулярно „легкой“ оси, 4 — фаза с полукруглыми вихрями и 90° блоховской доменной стенкой, 5 — фаза со 180° блоховскими доменными стенками, параллельными границе раздела, в областях одного типа. Штриховая линия соответствует зависимости $\delta_f(a)$, сплошная линия — линии фазовых переходов первого рода, C — критическая точка.

При $R \gg \Delta_f$ переход между монодоменной и полидоменной фазами является фазовым переходом первого рода, т. е. как и в случае $\gamma \ll 1$, при $R \sim \Delta_f$ на фазовой диаграмме толщина пленки–шероховатость имеет место критическая точка. Соответствующая фазовая диаграмма изображена на рис. 7.

Значение R_c , соответствующее точке фазового перехода при заданной толщине пленки, в области $R \gg \Delta_f$ находится аналогично случаю $\gamma \ll 1$. Единственное отличие состоит в замене ε_f на ε_{af} в выражении для энергии параллельных границ раздела доменных стенок в антиферромагнетике в монодоменной фазе. Это дает для величины R_c оценку

$$R_c = 2\nu a \gamma^{1/2}. \quad (13)$$

4. Заключение

Сформулируем основные результаты работы.

1) Прослежена эволюция доменных стенок нового типа, порождаемых фрустрациями обменного взаимодействия на шероховатой границе раздела ферромагнитной пленки и антиферромагнитной подложки, с ростом толщины пленки и (или) ростом характерной ширины атомных ступеней на границе раздела.

2) Получена фазовая диаграмма толщина пленки–шероховатость для тонкой пленки ферромагнетика на антиферромагнитной подложке с учетом энергии одноионной анизотропии.

3) Предсказано наличие на ней линии фазовых переходов первого рода, заканчивающейся в критической точке.

Экспериментальная проверка данных теоретических положений возможна методами магнитосиловой и спин-поляризованной туннельной микроскопии в процессе поmonoслоного роста пленки.

Список литературы

- [1] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **46**, 385 (2004).
- [2] В.Д. Левченко, А.И. Морозов, А.С. Сигов, Ю.С. Сигов. ЖЭТФ **114**, 1903 (1998).
- [3] В.Д. Левченко, А.И. Морозов, А.С. Сигов. Письма в ЖЭТФ **71**, 544 (2000).
- [4] U. Schlickum, N. Janke-Gilman, W. Wulfhekel, J. Kirschner. Phys. Rev. Lett. **92**, 107 203 (2004).
- [5] W. Wulfhekel, U. Schlickum, J. Kirschner. Microscopy Res. Tech. **66**, 105 (2005).
- [6] А. Хуберт. Теория доменных стенок в упорядоченных средах. Мир, М. (1977). 308 с.
- [7] J.C. Slonczewski. J. Magn. Magn. Mater. **150**, 13 (1995).