

Искажения магнитной структуры тонкого слоя антиферромагнетика в магнитном поле

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

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

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 26 октября 2006 г.)

Методами математического моделирования исследованы искажения магнитной структуры, индуцированные внешним магнитным полем в тонком слое одноосного коллинеарного антиферромагнетика с шероховатыми поверхностями. Показано, что в определенных условиях наличие на поверхностях атомных ступеней ведет к разбиению слоя антиферромагнетика на домены. Найден характер и величина искажений при произвольном соотношении между шириной атомных ступеней и радиусом корреляции параметра порядка.

Работа частично поддержана грантом CRDF–Минобрнауки РФ VZ-101-10 и грантами РФФИ № 06-01-00548-а и 05-02-19643-НЦНИЛ_а.

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

1. Введение

Антиферромагнитные слои нанометровой толщины обнаруживают существенные особенности своих физических свойств и находят широкое применение в современной магнитоэлектронике. Поэтому исследование их характеристик представляет несомненный интерес. Данная работа посвящена изучению искажений магнитной структуры, индуцированных магнитным полем в тонком плоскопараллельном слое одноосного коллинеарного антиферромагнетика с шероховатыми поверхностями и осью легкого намагничивания, лежащей в плоскости слоя. Будем предполагать, что некомпенсированные атомные плоскости параллельны границам слоя.

На шероховатой поверхности антиферромагнетика присутствуют атомные ступени высотой в один атомный слой. По разные стороны ступени число атомных плоскостей в слое отличается на единицу и поверхностный атомный слой принадлежит различным подрешеткам антиферромагнетика (рис. 1).

Антиферромагнитный слой можно мысленно разбить на области, границы которых перпендикулярны плоскости слоя. Плоскость границы проходит через край атомной ступени на одной из поверхностей слоя. Поведение намагниченности в каждой области определяется числом атомных плоскостей, принадлежащих каждой из двух подрешеток антиферромагнетика, и внутри области

остаётся неизменным. Тип области определяется комбинацией двух параметров: четностью числа атомных плоскостей (E (even) — четное, O (odd) — нечетное число) и номером подрешетки антиферромагнетика, которой принадлежит верхняя атомная плоскость (A или B). Всего возможны четыре комбинации и, следовательно, четыре типа областей (EA , EB , OA и OB).

Как было показано в нашей работе [1], в случае слоя с гладкими границами характер спин-фlop-перехода существенно зависит от четности числа атомных плоскостей.

1) В слое с четным числом атомных плоскостей спин-фlop-переход первого рода происходит в поле поверхностного спин-фlop-перехода. В результате возникает состояние с доменной стенкой, центрированной в середине слоя.

2) В слое с нечетным числом атомных плоскостей спин-фlop-переход второго рода возникает в поле, превышающем поле объемного спин-фlop-перехода и зависящем от толщины слоя.

Если характерное расстояние между ступенями R достаточно велико, то в магнитном поле антиферромагнитный слой разбивается на домены, границы которых совпадают с границами областей, т.е. перпендикулярны плоскости слоя и пересекают край атомной ступени на одной из его поверхностей. Поведение намагниченности в каждом домене диктуется типом соответствующей области.

Мы исследуем характер искажений магнитной структуры во всем диапазоне магнитных полей и значений величины R .

2. Описание модели

Ограничимся областью температур $T \ll T_N$ (T_N — температура Нееля), когда модули намагниченностей подрешеток можно считать неизменными, и случаем

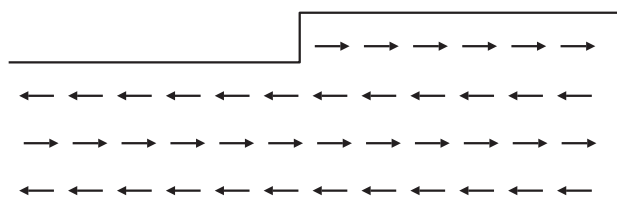


Рис. 1. Атомная ступень на поверхности антиферромагнетика.

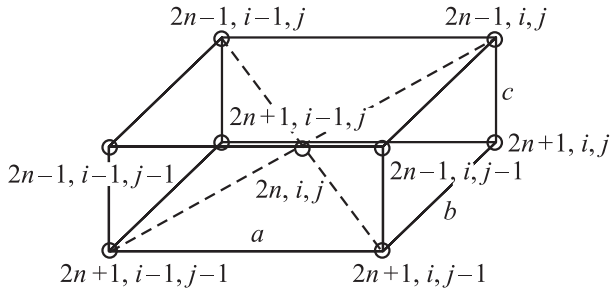


Рис. 2. Элементарная ячейка антиферромагнетика.

локализованных квазиклассических спинов в приближении гейзенберговского обменного взаимодействия между ближайшими соседями. Число последних для спинов, лежащих в поверхностной атомной плоскости, меньше, чем в объеме, что делает их более податливыми к воздействию внешнего магнитного поля. Именно поэтому значение поля поверхностного спин-флоп-перехода оказывается ниже соответствующего объемного значения [2–4].

Изучим слой, вырезанный перпендикулярно направлению [100] тетрагональной (с осью c , лежащей в плоскости слоя) или ромбической объемно центрированной решетки. Пронумеруем атомные плоскости (100), индексом n , начиная с самой верхней, присутствующей в образце с шероховатой поверхностью. Спины в четных и нечетных плоскостях принадлежат разным подрешеткам, т.е. плоскости являются некомпенсированными. Положение спина в атомной плоскости будет задаваться индексами i, j , определяющими узел прямоугольной решетки спинов (рис. 2).

Энергия обменного взаимодействия спинов принимает вид

$$W_{\text{ex}} = \frac{|J_{af}|S_{af}^2}{2} \sum_{n,i,j,\delta} (\mathbf{s}_{n,i,j}, \mathbf{s}_{(n,i,j)+\delta}), \quad (1)$$

где $J_{af} < 0$ — интеграл обмена между ближайшими спинами, S_{af} — величина спина атома, $\mathbf{s}_{n,i,j}$ — единичный вектор, задающий направление соответствующего спина, индекс δ нумерует ближайших к данному спину соседей. Вдали от поверхности число ближайших соседей равно восьми.

Введем декартову ортогональную систему координат с осями, параллельными кристаллографическим, причем ось z направлена перпендикулярно слою. Энергия одноионной анизотропии выражается как

$$W_{an} = K_{\perp} S_{af}^2 \sum_{n,i,j} (s_{n,i,j}^{(z)})^2 - K_{\parallel} S_{af}^2 \sum_{n,i,j} (s_{n,i,j}^{(x)})^2, \quad (2)$$

где K_{\parallel} — константа одноосной анизотропии, K_{\perp} — константа поверхностной анизотропии, введенная для того, чтобы учесть энергетическую невыгодность состояний, в которых возникающий магнитный момент имеет z -составляющую, перпендикулярную поверхности. При

$K_{\perp} > 0$ спины лежат в атомных плоскостях, параллельных поверхности, и их направление задается углом $\theta_{n,i,j}$, который в соответствующий спину магнитный момент образует с осью легкого намагничивания x , лежащей в плоскости. Прямой учет диполь-дипольного взаимодействия спинов и возникающих размагничивающих полей существенно усложняет задачу и резко увеличивает время расчета.

Зеемановская энергия имеет вид

$$W_Z = 2\mu_B S_{af} \sum_{n,i,j} (\mathbf{s}_{n,i,j}, \mathbf{B}_0), \quad (3)$$

где μ_B — магнетон бора, \mathbf{B}_0 — индукция внешнего магнитного поля, направленного параллельно легкой оси. Здесь учтено, что вектор спина антипараллелен вектору соответствующего ему магнитного момента.

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

$$\hbar S_{af} \frac{d}{dt} \mathbf{s}_{n,i,j} = [\mathbf{s}_{n,i,j}, \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \mu \mathbf{H}_{\text{eff}}, \quad (4)$$

где μ — затухание, а

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}^p = - \frac{\partial W}{\partial s_{n,i,j}^p}, \quad (5)$$

$p = x, y, z$, а W — суммарная энергия $W = W_{\text{ex}} + W_{an} + W_Z$. Решение системы уравнений (4) находилось „классическим“ методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Приход к равновесию контролировался по поведению суммарной энергии системы.

Для уменьшения числа параметров, характеризующих состояние антиферромагнитного слоя, введем две безразмерные величины, описывающие анизотропию и внешнее поле:

$$\alpha = \frac{K_{\parallel}}{|J_{af}|} \ll 1, \quad (6)$$

$$\beta = \frac{2\mu_B B_0}{|J_{af}| S_{af}}. \quad (7)$$

Как показано в классической работе Нееля [5], поле объемного спин-флоп-перехода β_1 равно

$$\beta_1 = \sqrt{32\alpha}. \quad (8)$$

Согласно работам [2–4], поле поверхностного спин-флоп-перехода имеет вид

$$\beta_s = \beta_1 / \sqrt{2} = 4\sqrt{\alpha}. \quad (9)$$

Радиус корреляции антиферромагнитного параметра порядка равен, согласно [1,6],

$$r_c = \frac{4}{\sqrt{|\beta_1^2 - \beta^2|}}. \quad (10)$$

Здесь и далее все расстояния даны в единицах соответствующих постоянных кристаллической решетки.

В поле поверхностного спин-флоп-перехода $r_s \equiv r_c(\beta_s) = 4/\beta_s = \alpha^{-1/2}$.

При моделировании предполагалось, что края ступеней параллельны оси y ортогональной системы координат, т.е. решалась двумерная задача с периодическими по x граничными условиями.

Поведение тонких ($a \ll r_s$, a — толщина слоя) и толстых ($a \gg r_s$) слоев антиферромагнетика в магнитном поле $\beta < \beta_1$ существенно различается. Поэтому рассмотрим эти случаи последовательно.

3. Результаты моделирования

3.1. Тонкий слой.

а) $R \gg r_s$. Изучим распределение спинов в областях всех типов, предполагая, что продольный размер области R превосходит другие характерные длины задачи. Если магнитное поле направлено параллельно намагниченности подрешетки A , то область OA обладает магнитным моментом, равным магнитному моменту одной некомпенсированной атомной плоскости и параллельным внешнему полю. Поэтому спин-флоп-переход в ней будет происходить в поле β_1^* , превышающем β_1 . Причем в отличие от спин-флоп-переходов в областях других типов это переход второго рода. Величину поля β_1^* можно найти из условия $2r_c(\beta_1^*) \approx a$ [1]. В случае тонкого слоя

$$\beta_1^* \approx \frac{8}{a} \gg \beta_1. \quad (11)$$

В области OB магнитный момент при включении поля направлен против него. В слое типа OB с гладкими границами изменение направления вектора антиферромагнетизма (равного разности намагниченностей подрешеток) на противоположное происходит в сколь угодно слабом поле. Поэтому такая исходная ориентация в работе [1] не исследовалась. В случае области конечных размеров переориентация вектора антиферромагнетизма сопровождается изменением ее типа с OB на OA и возникновением по периметру области 180° доменной стенки, перпендикулярной поверхности слоя.

Характерное поле этого фазового перехода можно найти, приравняв выигрыш в зеемановской энергии к энергии возникающей доменной стенки. Выигрыш в зеемановской энергии составляет величину порядка β на одну ячейку в плоскости слоя (здесь и далее энергия дана в единицах $|J_{af}|S_{af}^2$). Поверхностная энергия доменной стенки в антиферромагнетике составляет величину порядка $\sqrt{\alpha}$ в расчете на площадь элементарной ячейки, а ее толщина — порядка r_s . Поскольку площадь области на поверхности слоя $\sim R^2$, а площадь доменной стенки $\sim Ra$, то характерное поле переориентации равно

$$\beta_{\text{теор}} \approx \frac{a\sqrt{\alpha}}{R} \approx \frac{a}{R} \beta_1 \ll \beta_1. \quad (12)$$

Как показано далее, возникающая доменная стенка практически полностью расположена в области с четным

числом атомных плоскостей, поскольку образование доменной стенки в такой области не сопровождается заметным понижением зеемановской энергии.

Для описания доменной стенки, перпендикулярной слою и разделяющей домены разных типов, используем континуальное приближение, развитое в работе [6]. В рамках этого приближения стационарное распределение переменной $\theta = (\theta_A + \theta_B - \pi)/2$ (θ — угол, который вектор антиферромагнетизма образует с осью легкого намагничивания, индексы A и B относятся к разным подрешеткам антиферромагнетика) описывается дифференциальным уравнением

$$\Delta\theta = \frac{\beta_1^2 - \beta^2}{32} \sin 2\theta \quad (13)$$

с граничными условиями

$$-4 \frac{\partial\theta}{\partial z} + \Delta_{x,y}\theta = \pm\beta \sin \theta, \quad (14)$$

где $\Delta_{x,y}$ — двумерный лапласиан в плоскости слоя, а знаки плюс и минус в правой части отвечают случаю поверхностной атомной плоскости, принадлежащей подрешетке типа A и B соответственно.

Воспользовавшись неравенством $a \ll r_s$, проинтегрируем уравнение (13) по толщине слоя, причем все слагаемые, за исключением $\partial^2\theta/\partial z^2$, представим через их усредненные по слою значения, а оставшееся слагаемое проинтегрируем явно и для определения значения $\partial\theta/\partial z$ на границах слоя воспользуемся граничными условиями (14). В результате, считая, что число атомных плоскостей в слое $2a \gg 1$, получаем для случая нечетного числа атомных плоскостей

$$\Delta_{x,y}\theta = \pm \frac{\beta}{2a} \sin \theta + \frac{\beta_1^2 - \beta^2}{32} \sin 2\theta, \quad (15)$$

плюс соответствует областям типа OA , минус — областям типа OB .

Для областей с четным числом слоев

$$\begin{aligned} \frac{\partial\theta}{\partial z} \Big|_{z=a/2} - \frac{\partial\theta}{\partial z} \Big|_{z=-a/2} &\approx \mp \frac{1}{4} \beta (\sin \theta|_{z=a/2} - \sin \theta|_{z=-a/2}) \\ &\approx \mp \frac{1}{4} \beta a \cos \theta \frac{\partial\theta}{\partial z} \approx \frac{\beta^2 a}{32} \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (16)$$

В результате после усреднения по толщине слоя для областей типа EA и EB получаем

$$\Delta_{x,y}\theta = \frac{\beta_1^2 - 2\beta^2}{32} \sin 2\theta. \quad (17)$$

При рассмотрении плоской доменной стенки, параллельной плоскости yz , задача становится одномерной. Легко видеть, что уже в сравнительно слабых полях $\beta_1 \gg \beta > (a/r_s)\beta_s$ доменная стенка в области с нечетным числом атомных плоскостей имеет толщину

$$\delta_0 = \left(\frac{2a}{\beta} \right)^{1/2}, \quad (18)$$

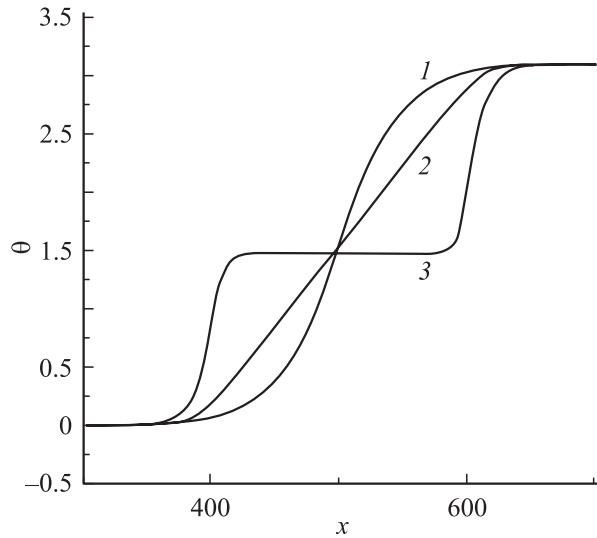


Рис. 3. Доменная стенка в области типа EA ($400 < x < 600$), расположенной между областями типа OA ($x < 400$) и OB ($x > 600$). Приведена зависимость ориентации магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток в центре слоя с $a = 10$ от координаты, отсчитываемой вдоль направления оси легкого намагничивания, перпендикулярного краям атомных ступеней на поверхностях слоя, в полях $\beta = 0.003$ (1), $\beta = \beta_s = 0.089$ (2) и $\beta = 0.5$ (3).

намного меньшую, чем r_c и толщина стенки λ в области с четным числом атомных плоскостей

$$\lambda = \frac{4}{\sqrt{\beta_1^2 - 2\beta^2}}. \quad (19)$$

Соответственно поверхностная энергия такой стенки существенно выше, именно поэтому перпендикулярная поверхности слоя доменная стенка, возникающая в поле переориентации на границе области OB , почти целиком расположена в области с четным числом атомных плоскостей. В случае параллельных краев атомных ступеней она располагается посередине области типа $EA(EB)$, разделяющей области типа OA и OB (рис. 3).

Толщина доменной стенки растет по мере роста магнитного поля, расходясь корневым образом в поле поверхностного спин-флоп-перехода (а не объемного, как радиус корреляции параметра порядка). При $\beta \rightarrow \beta_s$ доменная стенка занимает всю область типа $EA(EB)$, а в полях, превосходящих поле поверхностного спин-флоп-перехода, она плавно трансформируется в две 90° доменные стенки, расположенные на границах области (рис. 3). В центре области имеет место спин-флоп-состояние, в котором, как показано в работе [1], в центре слоя возникает 180° доменная стенка, параллельная поверхности слоя. Если в толстом слое намагниченности поверхностных атомных плоскостей практически параллельны внешнему полю, то в тонком слое уменьшается только центральная часть доменной стенки, в которой угол между намагниченностью подрешетки и

направлением магнитного поля изменяется практически линейно. В середине слоя намагниченности подрешеток ориентированы симметрично по отношению к внешнему полю и составляют с ним угол θ , близкий к $\pi/2$, как в случае объемного спин-флоп-перехода. Направление вращения намагниченности подрешетки определяется требованием минимальности угла между намагниченностью поверхностного слоя атомов и полем.

Если же область $EA(EB)$ лежит между двумя областями OB , то в поле переориентации в ней, так же как и в соседних областях, происходит разворот антиферромагнитного параметра порядка на 180° , доменная стенка не образуется, а область типа EA становится областью типа EB (и наоборот).

Спин-флоп-переход в области типа $EA(EB)$, разделяющей области типа OA , является фазовым переходом первого рода. Вследствие взаимодействия с соседними областями вектор антиферромагнетизма в центре области скачком изменяется на величину, меньшую $\pi/2$, на границах области возникают доменные стенки. По мере роста магнитного поля вектор антиферромагнетизма ориентируется перпендикулярно полю (рис. 4). Поле данного фазового перехода β_s^* превосходит значение β_s и может быть оценено из условия $2\lambda(\beta_s^*) \approx R$. Используя выражение (19), находим

$$\beta_s^* \approx \left(\beta_s^2 + \frac{2}{R^2} \right)^{1/2}. \quad (20)$$

Таким образом, в случае слабой шероховатости слоя, когда ширина ступеней $R \gg r_s$, в слое будут по мере роста магнитного поля последовательно происходить: переход переориентации в областях типа OB , спин-флоп-переход в областях типа $EA(EB)$ и спин-флоп-

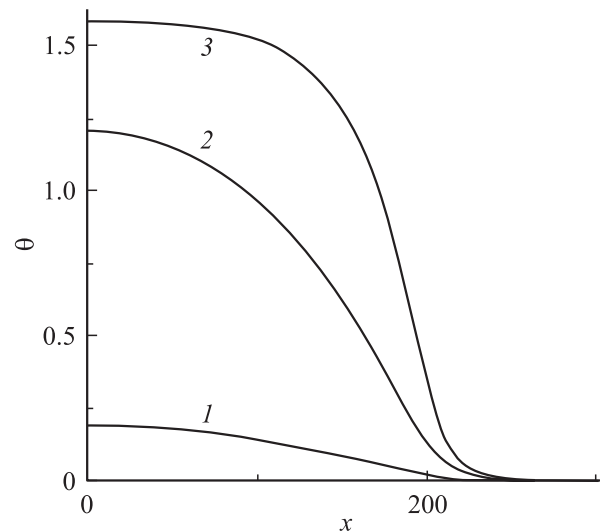


Рис. 4. Фазовый спин-флоп-переход в области типа EB , расположенной между областями типа OA ($x > 200$). Зависимости симметричны относительно оси ординат. Обозначения аналогичны таковым на рис. 3. Кривые соответствуют полям $\beta = 0.091$ (1), 0.095 (2) и 0.125 (3).

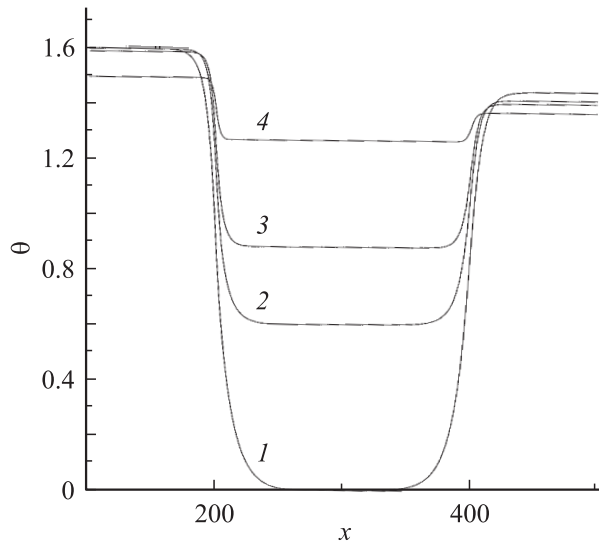


Рис. 5. Фазовый спин-флоп-переход в области типа OA ($200 < x < 400$), расположенной между областями типа EA ($x > 400$) и EB ($x < 200$). Обозначения аналогичны таковым на рис. 3. Кривые соответствуют полям $\beta = 0.5$ (1), 0.8 (2) 1 (3) и 2 (4).

переход в областях типа OA (рис. 5) соответственно. Взаимное влияние областей разного типа, конечность и различие их размеров приводят к некоторому размытию этих фазовых переходов.

б) $R \ll r_s$. Покажем, что в данном случае сильной шероховатости переориентация отдельных областей типа OB невозможна, а реализуется спин-флоп-переход во всем объеме слоя.

Предположим обратное. Для того чтобы переориентация области типа OB несущественно влияла на область типа OA , необходимо выполнение неравенства $R \gg \delta_0$ или

$$\beta \gg \beta_0 \approx \frac{a}{R^2}. \quad (21)$$

Доменная стенка между областями типа OA и OB будет целиком занимать область типа $EA(EB)$, их разделяющую, и иметь поверхностную энергию порядка R^{-1} . Оценивая поле переориентации в рамках соображений, использованных при получении выражения (12), находим $\beta_{\text{геог}} \approx a/R^2$, т.е. условие (21) не выполняется, и, следовательно, в данном случае действительно реализуется спин-флоп-переход во всем объеме слоя.

Найдем характерное поле „коллективного“ спин-флоп-перехода при $R \ll r_s$. Мы рассмотрим случай, когда суммарные площади σ_{OA} и σ_{OB} на поверхности слоя, занимаемые областями типа OA и OB , одинаковы. В противном случае поведение системы определяется доминирующим типом областей, а рассмотрение аналогично проведенному выше. Необходимо только учесть в энергетическом балансе фактор, равный отношению $(\sigma_{OA} - \sigma_{OB})/\sigma$ (σ — суммарная площадь поверхности слоя).

Предположим, что усредненный по объему слоя вектор антиферромагнетизма составляет угол θ с осью легкого намагничивания. В областях типа OA и OB вектор антиферромагнетизма разворачивается дополнительно на разные стороны на угол $\varphi \ll 1$ так, чтобы намагниченность лишней (непарной) атомной плоскости составила как можно меньший угол с магнитным полем. Соответствующий выигрыш в зеемановской энергии составляет величину порядка $\beta\varphi a^{-1} \sin \theta$ в расчете на одну ячейку, а проигрыш в обменной энергии при $R \gg a$ — величину порядка φ^2/R^2 . Минимизируя суммарную энергию по φ , находим, что $\varphi \approx \beta R^2 \sin \theta/a$, а выигрыш в суммарной энергии составляет величину порядка $\beta^2 R^2 \sin^2 \theta/a^2$ в расчете на одну ячейку. В поле спин-флоп-перехода он должен компенсировать проигрыш в энергии за счет опрокидывания подрешеток, равный $(\beta_1^2 - \beta^2) \sin^2 \theta$. В результате получаем поле спин-флоп-перехода β_{sf}

$$\beta_{sf} \approx \beta_1 \frac{a}{R} \ll \beta_1. \quad (22)$$

Легко проверить, что во всей области сильной шероховатости $\varphi(\beta_{sf}) \ll 1$ и $\delta_0(\beta_{sf}) \gg R$. Распределение намагниченности одной из подрешеток вдоль слоя антиферромагнетика после фазового спин-флоп-перехода первого рода изображено на рис. 6.

Если же $R \ll a$, то неоднородность антиферромагнитного параметра порядка захватывает только области толщиной порядка R вблизи каждой из поверхностей слоя, проигрыш в обменной энергии порядка φ^2/Ra , $\varphi \approx \beta R \sin \theta$ и

$$\tau_{sf} \equiv 1 - \frac{\beta_{sf}}{\beta_1} \approx \frac{R}{a} \propto R, \quad \tau_{sf} \ll 1. \quad (23)$$

С ростом поля величина φ нарастает и при $\beta \approx \beta_0$ становится порядка единицы. В случае $\beta_0 \ll \beta_1^*$, что

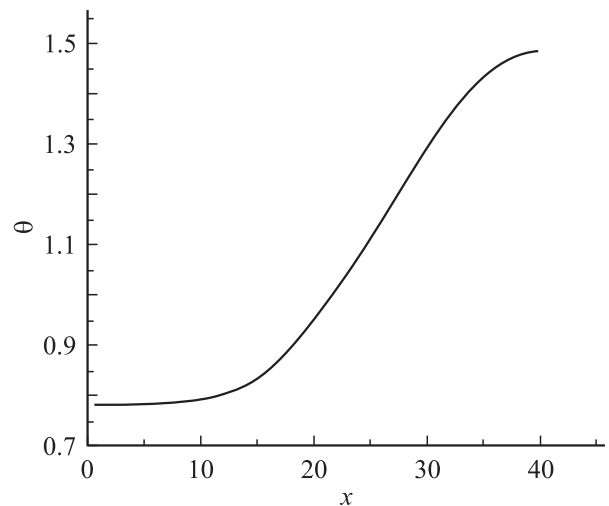


Рис. 6. „Коллективный“ фазовый спин-флоп-переход, произошедший в поле $\beta = 0.07$ в слое, содержащем области типа EB ($0 < x < 10$), OA ($10 < x < 20$), EA ($20 < x < 30$) и OA ($30 < x < 40$). Обозначения аналогичны таковым на рис. 3.

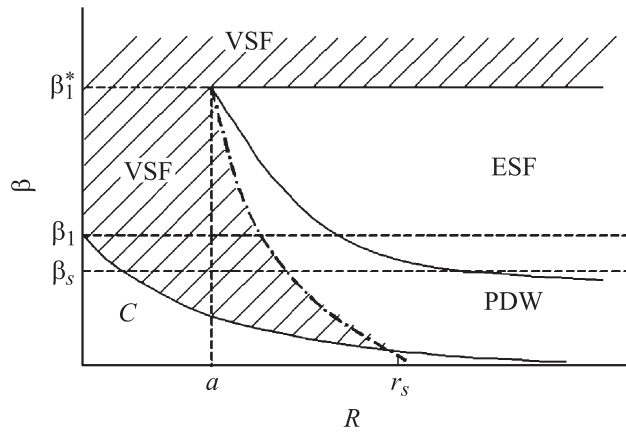


Рис. 7. Фазовая диаграмма магнитное поле–шероховатость для тонкого слоя. *C* — коллинеарная фаза; PDW — фаза с перпендикулярными поверхностями слоя доменными стенками, возникшими в результате переориентации областей типа *OB*; ESF — фаза, в которой спин-флоп-переход произошел только в областях типа *EB* и *EA*; VSF — объемная спин-флоп-фаза. Сплошными линиями показаны линии фазовых переходов.

эквивалентно условию $R \gg a$, в полях, бóльших β_0 , поведение областей различного типа становится „индивидуальным“ и совпадает с рассмотренным в предшествующем разделе. В противоположном пределе $R \ll a$ система остается в „коллективной“ спин-флоп-фазе.

В полях $\beta \gg \beta_1^*$, но меньших поля спин-флип-перехода, когда радиус корреляции антиферромагнитного параметра порядка $r_c \ll a$, объем слоя находится в спин-флоп-фазе, а искажения параметра порядка вблизи одной из поверхностей слоя не влияют на искажения у другой поверхности. Этот режим рассмотрен в нашей предшествующей работе [6].

Фазовая диаграмма магнитное поле–шероховатость тонкого слоя антиферромагнетика изображена на рис. 7.

3.2. Толстый слой.

а) $a \gg R \gg r_s$. В этом случае разбиение на поверхностные домены возникает независимо вблизи каждой из двух границ слоя в поле β_s . Начальный этап изменений характера искажений магнитной структуры по мере роста величины магнитного поля описан нами в работе [6]. При увеличении радиуса корреляции r_c его величина сравнивается с R в поле β_R

$$\tau_R \equiv 1 - \frac{\beta_R}{\beta_1} \approx \left(\frac{r_s}{2R} \right)^2. \quad (24)$$

При $\beta > \beta_R$ вблизи каждой поверхности слоя формируется система статических вихрей, проникающих в глубь слоя на расстояние порядка R , и параллельная поверхности доменная стенка толщиной r_c . Угол разворота намагниченности подрешетки в этой стенке зависит от соотношения между суммарными площадями σ_A и σ_B областей двух типов, на которые края ступеней разбивают данную поверхность. Тип области

определяется подрешеткой, которой принадлежит верхняя атомная плоскость. В случае $\sigma_A = \sigma_B$ возникает 90° доменная стенка, а разворот антиферромагнитного параметра порядка в вихре в областях разного типа происходит практически на $\pi/2$, но в разные стороны так, чтобы намагниченность верхней атомной плоскости была параллельна внешнему магнитному полю.

С ростом поля доменные стенки становятся толще в силу расходимости r_c (см. (10)), и в поле β_a , при котором $2r_c(\beta_a) \approx a$, как показало моделирование, происходит фазовый переход первого рода середины слоя в спин-флоп-фазу (рис. 8).

Величина поля β_a равна

$$\tau_a \equiv 1 - \frac{\beta_a}{\beta_1} = \left(\frac{r_s}{a} \right)^2. \quad (25)$$

б) $a \gg r_s \gg R$. Этот случай соответствует области слабых вихревых искажений. Как показано в работе [6], в поле β_{sf}^* , для которого

$$\tau_{sf}^* \equiv 1 - \frac{\beta_{sf}^*}{\beta_1} \approx \left(\frac{R}{r_s} \right)^2 \ll 1, \quad (26)$$

вблизи каждой поверхности слоя образуется система статических вихрей, в которых антиферромагнитный параметр порядка разворачивается на угол порядка R/r_s , а также 90° доменная стенка. Затем в поле β_a происходит спин-флоп-переход в объеме слоя. Такой сценарий реализуется при $\tau_a < \tau_{sf}^*$, что соответствует условию $aR > r_s^2$.

В противоположном случае ($aR < r_s^2$) имеет место другой ход событий. В некотором поле $\tilde{\beta}$ весь объем слоя сразу переходит в спин-флоп-фазу со слабыми

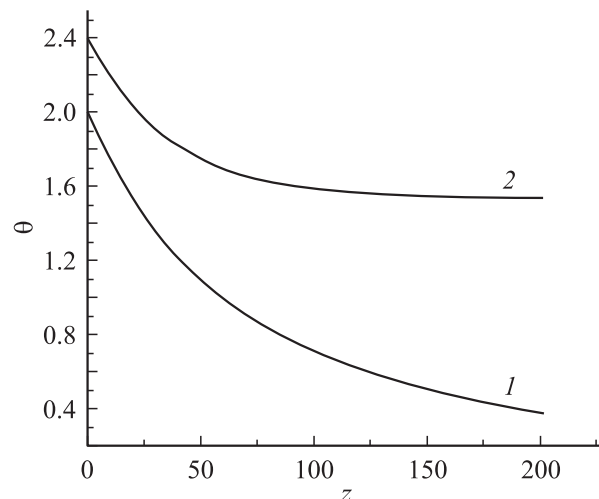


Рис. 8. Зависимости ориентации магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток для слоя с $a = 1000$ от координаты z , отсчитываемой вдоль направления, перпендикулярного слою. 1 — до ($\beta = 0.122$), 2 — после ($\beta = 0.123$) объемного спин-флоп-перехода. Поверхности слоя соответствуют $z = 0$.

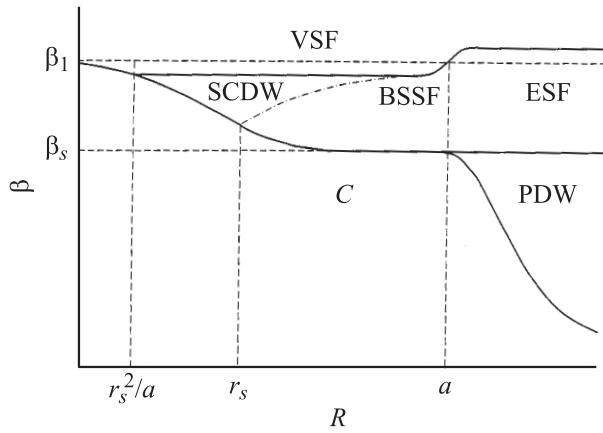


Рис. 9. Фазовая диаграмма магнитное поле—шероховатость для толстого слоя. BSSF — фаза с поверхностным спин-флоп-переходом в областях типа *B*, SCDW — фаза с поверхностными 90° доменными стенками, параллельными слою. Остальные обозначения те же, что и на рис. 7.

вихревыми искажениями вблизи поверхностей. Соответствующую величину $\tilde{\tau}$ можно оценить из следующих соображений: характерный выигрыш в энергии за счет возникновения слабых искажений составляет по порядку величины R/r_s^2 на одну ячейку поверхности слоя [6]. Проигрыш в энергии (на одну ячейку поверхности слоя) за счет возникновения спин-флоп-фазы в поле, меньшем критического поля β_1 , равен по порядку величины $a(\beta_1^2 - \beta^2) \approx a\tilde{\tau}/r_s^2$. Отсюда

$$\tilde{\tau} \approx R/a. \quad (27)$$

с) $R \gg a \gg r_s$. В этом случае малой шероховатости поверхностей реализуется сценарий, аналогичный случаю $R \gg r_s$ для тонкого слоя: по мере роста магнитного поля последовательно происходят переход переориентации в областях типа *OB* в поле $\beta_{\text{реор}}$ (см. (12)), спин-флоп-переход в областях типа *EA(EB)* в поле β_s и спин-флоп-переход в областях типа *OA* в поле β_1^* (превышающем β_1), величину которого можно найти из условия $2r_c(\beta_1^*) \approx a$. Существенные отличия от случая тонкого слоя сформулированы далее.

1) В поле β_s в областях типа *EA(EB)* в центре слоя возникает параллельная его границам 180° доменная стенка, которая имеет толщину порядка r_s и занимает только часть толщины слоя. По мере увеличения поля и приближения к полю объемного спин-флоп-перехода стенка захватывает всю толщу слоя в силу расходимости r_c . Это происходит в поле β_a (25). При дальнейшем росте поля толщина доменной стенки перестает расти, оставаясь конечной при $\beta \rightarrow \beta_1$.

Чтобы продемонстрировать этот факт, обратимся к уравнению (13). В одномерном случае в пределе $r_c \gg a$ оно принимает вид $\theta''_{zz} = 0$, что свидетельствует о линейной зависимости угла разворота подрешеток в объеме слоя. В центре слоя угол $\theta = \pi/2$, к поверхности слоя он

изменяется на величину χ так, чтобы намагниченность верхней атомной плоскости составила устрый угол с направлением приложенного магнитного поля. Значение χ находится из граничного условия (14): $4\theta'_z = \pm\beta \sin \theta$, которое преобразуется к виду

$$\chi = \gamma \cos \chi, \quad (28)$$

где $\gamma = a\beta/8 \approx a/\sqrt{2}r_s$. При $\gamma \ll 1$ величина $\chi \approx \gamma$, а при $\gamma \gg 1$ имеет место соотношение $\chi \approx \frac{\pi}{2}(1 - \gamma^{-1})$.

В полях $\beta > \beta_1$ доменная стенка распадается на две почти 90° доменные стенки, локализованные вблизи поверхностей слоя. Такое изменение формы стенки полностью аналогично изображенному на рис. 3.

2) Доменная стенка, перпендикулярная поверхности слоя и разделяющая области с четным и нечетным числом атомных плоскостей, в полях, близких к β_1 , имеет следующую структуру: ее ширина ξ вблизи поверхности слоя, содержащей край атомной ступени, равна $\xi_0 \sim \beta^{-1}$. Толщина стенки растет линейно по мере удаления от поверхности, причем $d\xi/dz \sim 1$, и достигает величины $\xi \approx \min(r_c, a)$. В случае $r_c < a$ при дальнейшем удалении от поверхности слоя, содержащей ступень, толщина доменной стенки не изменяется. В случае $r_c > a$ рост толщины стенки продолжается вплоть до противоположной поверхности слоя, а энергия подобной доменной стенки в расчете на длину элементарной ячейки на поверхности слоя порядка $\ln(a/\xi_0)$ [6–8].

В полях $\beta \gg \beta_1^*$ поведение системы аналогично таковому для случая тонкого слоя. Фазовая диаграмма магнитное поле—шероховатость толстого слоя антиферромагнетика изображена на рис. 9.

4. Выводы

1) Предсказан характер искажений магнитной структуры, индуцированных внешним магнитным полем в слое одноосного коллинеарного антиферромагнетика с шероховатыми поверхностями.

2) Изучены различные сценарии возникновения спин-флоп-состояния и его дальнейшей эволюции, реализация которых определяется соотношением между характерным расстоянием между краями атомных ступеней на поверхностях слоя, его толщиной и радиусом корреляции параметра порядка.

3) Предсказаны новые типы доменных стенок и оценены их характерные толщины.

4) Получены фазовые диаграммы „магнитное поле—шероховатость“ для случаев тонких и толстых антиферромагнитных слоев.

Авторы благодарят В.Д. Левченко за консультации при написании кода для решения систем уравнений Ландау–Лифшица–Гильберта.

Список литературы

- [1] А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **47**, 2009 (2005).
- [2] D.L. Mills. Phys. Rev. Lett. **20**, 18 (1968).
- [3] D.L. Mills, W.M. Saslow. Phys. Rev. **171**, 488 (1968).
- [4] F. Keffer, H. Chow. Phys. Rev. Lett. **31**, 1061 (1973).
- [5] L.E.F. Neel. Ann. Phys. **5**, 232 (1936).
- [6] А.И. Морозов, И.А. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **48**, 1798 (2006).
- [7] В.Д. Левченко, А.И. Морозов, А.С. Сигов, Ю.С. Сигов. ЖЭТФ **114**, 1817 (1998).
- [8] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **46**, 385 (2004).