Неоднородные состояния и механизм перемагничивания цепочки классических диполей

© И.Р. Каретникова, И.М. Нефедов, М.В. Сапожников, А.А. Фраерман, И.А. Шерешевский

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603600 Нижний Новгород, Россия

E-mail:andr@ipm.sci-nnov.ru

(Поступила в Редакцию 30 января 2001 г.)

Численно и аналитически изучены неоднородные состояния (солитоны) в цепочке классических диполей. Аналитическое решение задачи основано на длинноволновом приближении для дипольных сумм, которое справедливо при больших полях, перпендикулярных цепочке. Получено хорошее соответствие аналитического и численного решений. Методом численного моделирования, основанным на решении стохастических уравнений Ландау–Лифшица, исследован процесс перемагничивания. Показано, что перемагничивание цепочки диполей при конечной температуре носит термоактивационный характер и осуществляется путем образования зародыша стабильной фазы (солитона на краю цепочки) и дальнейшего разрастания (движения солитона вдоль цепочки).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 00-02-16485).

Интерес к упорядоченным системам ферромагнитных наночастиц связан в первую очередь с перспективой создания на их основе устройств для сверхплотной ($> 10^{10}$ bit/cm^2) записи и хранения информации. С другой стороны, исследование ансамбля однодоменных магнитных частиц предоставляет уникальную возможность изучения коллективных эффектов, обусловленных хорошо определенным взаимодействием частиц. В силу большого (по сравнению с межатомным) размером частиц их магнитный момент можно считать классической величиной. Фундаментальной причиной взаимодействия являются магнитостатические поля, создаваемые однодоменными частицами. Такое взаимодействие обычно теоретически исследуется в дипольном приближении. При этом частица представляется точечным диполем с магнитным моментом, пропорциональным ее объему. Это приближение справедливо в двух случаях: а) когда расстояние между частицами много больше их размеров, в) когда форма частиц близка к сферической. В настоящей работе аналитически и численно исследуются неоднородные состояния (солитоны) в цепочках классических диполей и их роль в процессах перемагничивания при конечной температуре. Упорядоченные цепочки ферромагнитных наночастиц могут быть синтезированы либо в процессе самоорганизации [1], либо методом нанолитографии [2,3]. Экспериментально исследуются не изолированные цепочки, а системы цепочек. Однако в силу малости межцепочечного взаимодействия по сравнению с внутрицепочечным [4] теоретическое исследование цепочки классических диполей представляется важным для понимания экспериментальной ситуации.

1. Солитон в одномерной цепочке трехмерных диполей

Начнем с вычисления спектра малых (линейных) возбуждений в неограниченной цепочке. Невозбужденному состоянию соответствует параллельная ориентация диполей $\mathbf{M} = (M_0, 0, 0)$. Линеаризуя уравнение Ландау–Лифшица, для Фурье-образов малых поправок $\mathbf{m}$ в безразмерных переменных имеем

$$\frac{\partial m_x}{\partial \tau} = 0, \quad \frac{\partial m_y}{\partial \tau} = -2m_z(\mathbf{D}(k) + 2D(0)),$$

$$\frac{\partial m_z}{\partial \tau} = 2m_y(D(k) + 2D(0)), \quad D(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos kn}{n^3}, \quad (1)$$

$\tau = t\gamma M_0$, t — время, γ — гиромагнитное отношение, M_0 — намагниченность цепочки. Расстояние между ближайшими диполями принято за единицу. При выводе (1) учтено, что $D_{zz} = D_{yy} = -D_{xx}/2 = 1/n^3$, а все недиагональные компоненты дипольного тензора равны нулю, $D(0) \equiv D(k = 0)$. Зависимость частоты собственных колебаний от волнового числа легко найти

$$\omega(k) = 2(D(k) + 2D(0)). \quad (2)$$

Частоты малых колебаний отличны от нуля, что обусловлено анизотропией дипольного взаимодействия. Таким образом, вычисление среднего квадрата угла отклонений диполей от оси X в гауссовом приближении дает конечную величину. Это не означает, однако, что в одномерной цепочке диполей при конечной температуре существует дальний порядок [5]. Дальний порядок разрушается в этой системе нелинейными возбуждениями подобно тому, как это происходит в одномерной модели Изинга. Задача нахождения корреляционного радиуса (или равновесной концентрации возбуждений) гораздо сложнее, чем в модели Изинга. Дело в том, что изинговские возбуждения образуют идеальный газ и их равновесная концентрация $\sim \exp(-2J/T)$, J — энергия взаимодействия спинов. В дипольной системе солитоны взаимодействуют, и до сих пор задача вычисления термодинамических характеристик цепочки трехмерных классических диполей не решена. Поэтому представляет интерес определение энергии и структуры нелинейных возбуждений (солитонов) в этой системе. Отметим, что солитоны играют также существенную роль в процессах перемагничивания цепочки диполей при конечной температуре.

Энергия цепочки диполей во внешнем магнитном поле имеет вид

$$E = \frac{1}{2}\sum_{n\neq m}^{\infty}\frac{1}{|n-m|^3}\big[M_y(n)M_y(m) + M_z(n)M_z(m) - M_x(n)M_x(m)\big] - \mathbf{H}\sum_n \mathbf{M}(n). \qquad (3)$$

Аналитическое определение экстремалей этого функционала является очень сложной задачей. Поэтому мы рассмотрим частный случай, когда внешнее магнитное поле направлено перпендикулярно цепочке $\mathbf{H} = (0, H, 0)$ и достаточно велико. Как будет показано далее, это позволяет использовать длинноволновое приближение. Запишем энергию (3) в Фурье-представлении

$$E = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Big(D(k)\big[M_y(k)M_y(-k) + M_z(k)M_z(-k) - 2M_x(k)M_x(-k)\big] - HM_y(k)\Big)\Big)dk. \qquad (4)$$

Пользуясь интегральным представлением $D(k)$ [6]

$$D(k) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos kn}{n^3} = \int_0^{\infty}\frac{t^2(e^t\cos k - 1)}{1 - 2e^t\cos k + e^{2t}}dt, \qquad (5)$$

в длинноволновом приближении $(k \to 0)$ получим

$$D(k) \simeq \zeta(3) + \frac{1}{2}\left(k^2\ln k - \frac{3}{2}k^2\right), \qquad (6)$$

$\zeta(3) \simeq 1.2$ — функция Римана. Первое слагаемое описывает анизотропию цепочки, второе соответствует магнитодипольному взаимодействию в приближении сплошной среды, третье — "псевдообменное" слагаемое — вводится из-за дискретности рассматриваемой системы. Функционал энергии в длинноволновом приближении принимает вид

$$E = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{3}{2}\left[\left(\frac{\partial M_x}{\partial n}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial M_y}{\partial n}\right)^2\right] - 3\zeta(3)M_x^2 - HM_y\right)dn - \pi\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial M_x}{\partial n}\frac{\partial M_x}{\partial m} - \frac{1}{2}\frac{\partial M_y}{\partial n}\frac{\partial M_y}{\partial m}\right)\frac{1}{|n-m|}\,dndm. \qquad (7)$$

При записи (4) предполагается, что в больших полях H z-компонента магнитного момента равна нулю. Абсолютному минимуму этого функционала соответствует однородное распределение магнитного момента $\cos\varphi_0 = H/6\zeta(3)$, φ — угол между направлениями поля и магнитного момента. При H, близких к полю анизотропии $6\zeta(3)$, отклонение $\mathbf{M}$ от оси Y мало. Ограничиваясь членами $\sim \varphi^4$, получаем уравнение для экстремалей (7)

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 2(\psi - \psi^3) + 2\pi\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{dy}{|x-y|} = 0, \qquad (8)$$

где $\varphi = \varphi_0\psi$, $x = \ln$, $\varphi^2 = 2(1-h)$ — равновесное значение угла, $l^2 = 2/(\zeta(3)\varphi^2)$ — характерный размер задачи, $h = H/6\zeta(3)$. При $h \to 1$ $l \gg 1$ и длинноволновое описание оправдано. Нас интересуют решения (8), удовлетворяющие граничным условиям $\psi(x \to \pm\infty) = \pm 1$. Решение уравнения (8) будем искать в виде

$$\psi = \mathrm{tg}\,hx + f(x). \qquad (9)$$

Первое слагаемое описывает ядро солитона, размер которого возрастает с ростом поля по корневому закону $\sim (1-h)^{0.5}$, а также выход на асимптотические значения ± 1. Из симметрии задачи и вида граничных условий следует, что $f(-x) = -f(x)$, $f(|x| \to \infty) \to 0$. Найдем закон изменения $f(x)$ при больших значениях x, который определяет закон взаимодействия солитонов на больших расстояниях. Предполагая $f(x) \ll \mathrm{tg}\,hx$, получим

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 4f + \frac{6}{\cos h^2 x}f = -2\pi\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\cos h^2 y}\frac{dy}{|x-y|} - 2\pi\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{|x-y|}. \qquad (10)$$

При больших x можно пренебречь первыми двумя слагаемыми в левой части уравнения. В силу свойств функции $f(x)$ соответствующее ей распределение "магнитных" зарядов имеет нулевой суммарный заряд. Действительно, $\partial\varphi/\partial x \sim \partial M_x/\partial x = \mathrm{div}\mathbf{M}$ определяет "плотность зарядов" в магнитостатике. Поэтому вторым слагаемым в левой части уравнения также можно пренебречь. В итоге имеем

$$f(x) \sim \mp\frac{1}{x^2}, \quad x \to \pm\infty. \qquad (11)$$

Этот результат легко понять, если учесть, что рассматриваемый солитон (доменная стенка) является в магнитостатическом смысле заряженным. Солитону соответствует отрицательный магнитный заряд, распределенный внутри ядра. На больших по сравнению с размером ядра расстояниях этот заряд можно считать точечным, создающим поле, направленное к центру солитона и уменьшающееся как $1/x^2$.

Для проверки сделанных выше предложений о структуре солитона в одномерной цепочке диполей, а также определения его структуры в малых полях мы провели численные расчеты. Моделирование основано на решении системы уравнений Ландау–Лифшица (см. далее). Солитонные решения выбирались посредством задания начальных условий. На рис. 1 приведены результаты расчета зависимости собственной энергии солитона от внешнего магнитного поля. В области больших полей энергия солитона хорошо аппроксимируется выражением $E = 3/4(6\zeta(3) - H)^{1.5}$. Эта зависимость энергии солитона от внешнего поля следует из выражения (7). Действительно, энергия солитона пропорциональна отношению квадрата равновесного угла ($\varphi^2 \sim (1 - h)$) к "толщине" солитона ($l \sim (1 - h)^{-0.5}$). В итоге имеем $E \sim (1 - h)^{1.5}$.

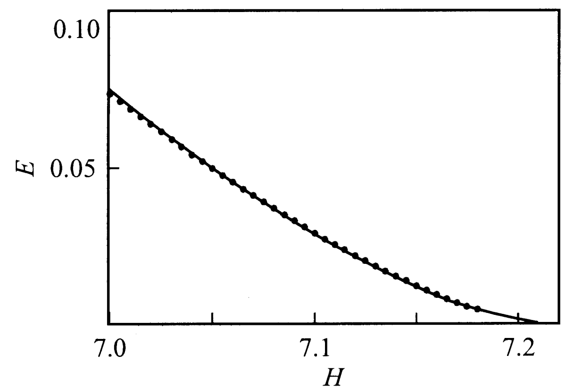

Рис. 1. Зависимость собственной энергии солитона в области полей, близких к полю насыщения (в безразмерных единицах). Сплошная линия — $E = 0.76\ (6\zeta(3) - H)^{1.5}$, точками показаны результаты численного решения.

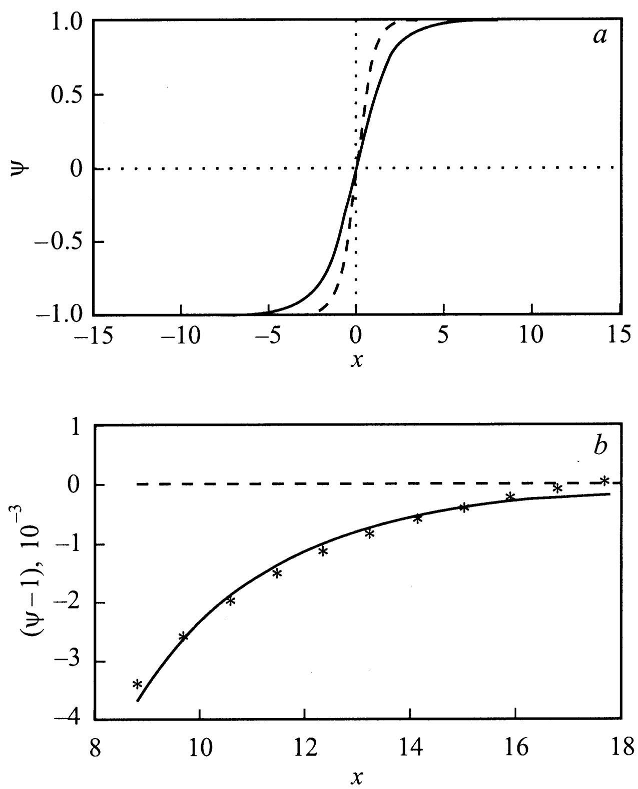

Рис. 2. *a* — распределение намагниченности в солитоне при внешнем поле $h = 0.9844$ (в безразмерных единицах). Штриховая линия $\psi = \mathrm{th}x$, сплошная линия — результаты численного моделирования. *b* — распределение намагниченности при больших расстояниях. Точки — численное решение, сплошная линия — $\psi = 1 - 1/x^2$.

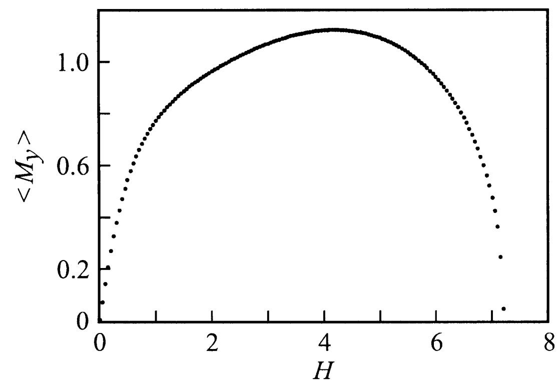

Рис. 3. Зависимость y-компоненты $\langle M_y \rangle$ интегрального магнитного момента солитона от внешнего поля (результаты численного решения в безразмерных единицах).

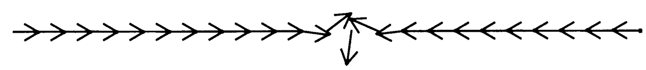

Рис. 4. Распределение магнитных моментов диполей при отсутствии внешнего поля.

На рис. 2 представлены результаты расчетов распределения намагниченности в солитоне. Численное моделирование подтверждает правильность наших представлений о структуре солитонов в больших ($H \sim 6\zeta(3)$) полях. На рис 3 показана зависимость интегрального значения y-компоненты собственной намагниченности солитона

$$\langle M_y \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} (\cos\varphi - \cos\varphi_0)dx.$$

При уменьшении поля структура солитона отличается от определенной аналитически. В частности, y-компонента магнитного момента солитона обращается в нуль при $H = 0$, а ядро солитона имеет "антиферромагнитную" структуру (рис. 4).

2. Термоактивационный механизм перемагничивания цепочки диполей

Как отмечалось, солитоны играют существенную роль при перемагничивании цепочки диполей. Рассмотрим цепочку частиц, дипольный момент которых направлен вдоль оси X. Если система помещена во внешнее поле, направленное против магнитного момента, то начальное состояние является метастабильным вплоть до некоторого поля H_c. При $H > H_c$ диполи ориентируются по полю — цепочка перемагничивается, при этом H_c является полем коэрцитивности цепочки. Стандартный анализ системы на устойчивость показывает, что

$$H_c = 2\min[D(k) + 2\zeta(3)],$$

где $D(k)$ определено в (5). Поскольку минимальное значение $D(k)$ соответствует краю зоны Бриллюэна, такой механизм перемагничивания получил название "развееривания" [7]. При конечной температуре перемагничивание может происходить иначе. Известно, что распад метастабильного состояния происходит через образование критического зародыша стабильной фазы и последующее его разрастание. Этот механизм обсуждался в [8,9] применительно к перемагничиванию тонкого ферромагнитного цилиндра. Ключевым при этом является вопрос о структуре и энергии критического зародыша, так как вероятность перемагничивания пропорциональна $\exp(-E_c/kT)$, E_c — энергия критического зародыша, T — температура, k — постоянная Больцмана.

Пусть в цепочке диполей, ориентированных в положительном направлении оси X, возник зародыш, содержащий l частиц, магнитные моменты которых ориентированы вдоль поля. Изменение энергии системы, связанное с образованием зародыша, представим в виде

$$\Delta E(l) = \varepsilon(l) - 2hl. \tag{12}$$

Первое слагаемое отвечает увеличению энергии из-за образования двух солитонов на границе зародыша, второе слагаемое соответствует понижению энергии системы из-за взаимодействия с внешним полем. "Поверхностный" вклад в энергию $\varepsilon(l)$ включает собственную энергию двух солитонов и энергию их взаимодействия. Ясно, что при достаточно больших L взаимодействие солитонов обусловлено наличием у них магнитостатического заряда, пропорционального $-\mathrm{div}\mathbf{M}$. Энергия их взаимодействия при этой $\sim 4/l$. Притяжение солитонов приводит к существованию критического зародыша, размер которого $l_c \sim 1/\sqrt{h}$, а энергия $E_c \simeq 2\varepsilon_0 - 4\sqrt{h}$ (ε_0 — собственная энергия одиночного солитона). Таким образом, в исследуемой системе возможно существование критического зародыша новой фазы, вероятность образования которого $\sim \exp(-E_c(h)/T)$.

Для проверки этой гипотезы мы провели численное моделирование процесса перемагничивания в цепочке диполей. Численная схема основана на решении системы стохастических уравнений Ландау–Лифшица, которая в безразмерных переменных имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tau} = -[\mathbf{mh}] - \lambda[\mathbf{m}[\mathbf{mh}]], \tag{13}$$

$h_i(x) = h_{0i} - \sum_y D_{ik}(\mathbf{x}-\mathbf{y})m_k(\mathbf{y}) + \xi_i(\mathbf{x},\tau)$ — суммарное магнитное поле, действующее на частицу с координатой $\mathbf{x}$. Безразмерные переменные выбраны следующим образом: $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$, $\mathbf{h} = \mathbf{H}/M_s$, $\tau = t\gamma M_s/(1+\lambda^2)$, $\mathbf{x} = \mathbf{r}/v^{1/3}$. M_s — магнитный момент частицы (в расчетах использовано значение $M_s = 800\,\mathrm{G}$, соответствующее пермаллою), v — объем частицы ($v = 8\cdot 10^{-18}\,\mathrm{cm}^3$), $\gamma = 1.76\cdot 10^7\,\mathrm{Oe}^{-1}\cdot\mathrm{s}^{-1}$, λ — безразмерная константа затухания ($\lambda = 0.1$). Расстояние между центрами частиц выбиралось равным 50 nm. Эффективное поле $\mathbf{h}(x)$, действующее на частицу в точке $\mathbf{x}$, включает однородное внешнее поле $\mathbf{h}_0$, поле, создаваемое всеми другими частицами в данной точке, и случайное поле $\xi(\mathbf{x},\tau)$, моделирующее действие на частицу термостата. Поле ξ считается дельта-коррелированной случайной гауссовой величиной

$$\langle\xi_i\rangle = 0, \quad \langle\xi_i(\mathbf{x},\tau_p)\xi_j(\mathbf{y},\tau_q)\rangle = \Gamma^2\delta_{ij}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})\delta_{pq}. \tag{14}$$

Интенсивность этих флуктуаций в соответствии с флуктуационно-диссипационной теоремой пропорциональна температуре $\Gamma^2 = 2kT\lambda/M_s^2 v\Delta\tau$, $\Delta\tau$ — шаг интегрирования по времени.

Обозначим вероятность появления критического зародыша в единицу времени $\alpha(T, h_0)$. Чтобы рассчитать α, рассмотрим случайную величину θ — момент появления зародыша. Плотность распределения этой величины имеет вид $p(\theta) = \alpha\exp(-\alpha\theta)$. Таким образом, среднее время до появления зародыша (время ожидания зародыша) $\langle\theta\rangle = 1/\alpha$. Алгоритм вычисления этой величины состоит в следующем. Выберем начальные условия в виде

$$\mathbf{m}(t=0) = (1, 0, 0).$$

Приложим внешнее магнитное поле против оси X, $\mathbf{h} = (-h_0, 0, 0)$. Решаем систему (13) до момента θ, когда перевернется половина всех диполей в цепочке $\sum m_x(n,\theta) = 0$. Время θ несколько больше времени появления необратимо растущего зародыша новой фазы θ. Поскольку $\tilde{\theta} - \theta \ll \theta$, этой разницей пренебрегаем (цепочка состоит из 50 частиц). Повторяя

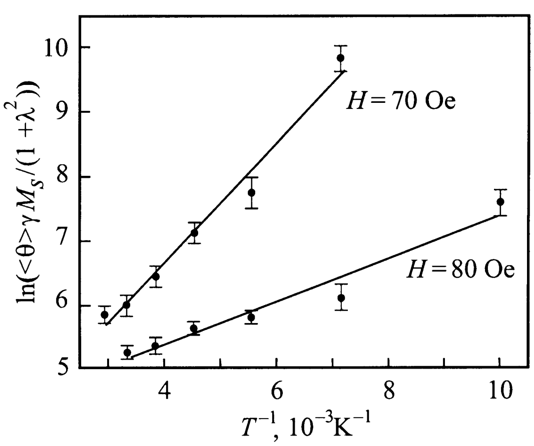

Рис. 5. Зависимость логарифма времени ожидания "перемагничивания" цепочки из 50 частиц от T^{-1} при значениях внешнего поля $H = 70$ и 80 Oe.

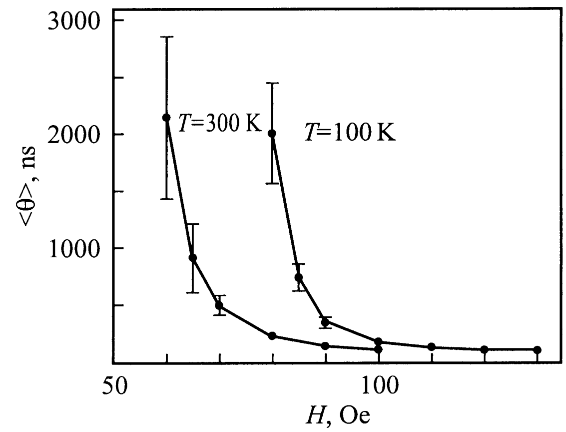

Рис. 6. Зависимость времени $\langle\theta\rangle$ ожидания "перемагничивания" цепочки из 50 частиц от внешнего поля при двух значениях температуры. Для температуры $T = 300\,\mathrm{K}$ усреднение проводилось по 20 реализациям, а для $T = 100\,\mathrm{K}$ — по 30 реализациям.

эту процедуру K раз (при моделировании мы выбирали $K = 30$), получаем выборочные значения случайной величины $\tilde{\theta}_i$ при заданном внешнем поле и температуре. Тогда $\langle\tilde{\theta}\rangle \simeq (\sum\limits_{i=1}^{K} \tilde{\theta}_i)/K = 1/\alpha$.

Мы чаще наблюдали появление зародыша на краю цепочки, что, по всей видимости, связано с уменьшением энергии критического зародыша на краю цепочки по сравнению с его энергией в объеме.

Зависимость $\lg\langle\tilde{\theta}\rangle$ от T^{-1} хорошо аппроксимируется прямой, что доказывает активационный характер перемагничивания (рис. 5). На рис. 6 показана зависимость времени ожидания зародыша от внешнего магнитного поля, которая, несмотря на вероятностный характер перемагничивания, может описываться некоторым критическим значением. Так, при $T = 300\,\mathrm{K}$ при величине поля больше $\sim 60\,\mathrm{Oe}$ время перемагничивания сокращается. Можно полагать, что поле коэрцитивности равно 60 Oe. Естественно, что с увеличением времени ожидания, которое определяется условиями проведения эксперимента, это "критическое" поле уменьшается.

Авторы благодарят Д.И. Крыжкова за помощь в проведении расчетов.

Список литературы

[1] A. Sugavara, M.R. Sheinfein. Phys. Rev. **B56**, *4*, R8499 (1997).
[2] С.А. Гусев, Л.А. Мазо, И.М. Нефедов, Ю.Н. Ноздрин, М.В. Сапожников, Л.В. Суходоев, А.А. Фраерман. Письма в ЖЭТФ **68**, *6*, 475 (1998).
[3] P.R. Cowburn, D.K. Koltsov, A.O. Adeyeye, M.E. Welland, D.M. Tricker. Phys. Rev. Lett. **83**, *5*, 1042 (1999).
[4] В.М. Розенбаум, В.М. Огенко, А.А. Чуйко. УФН **161**, *20*, 79 (1991).
[5] S.A. Cannas. Phys. Rev. **B52**, *5*, 3034 (1995).
[6] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. Элементарные функции. Наука, М. (1981).
[7] J.S. Jacobs, C.P. Bean. Phys. Rev. **100**, *4*, 1060 (1955).
[8] H.-B. Braun. Phys. Rev. Lett. **71**, *23*, 3558 (1993).
[9] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).