Численное моделирование „тонкой“ структуры доменных границ в редкоземельных ортоферритах

© Е.Г. Екомасов, М.А. Шабалин

Башкирский государственный университет,
450074 Уфа, Россия

(Поступила в Редакцию 15 ноября 2002 г.
В окончательной редакции 31 января 2003 г.)

С помощью численных методов найдена структура одиночной доменной границы (ДГ) с линией Блоха в редкоземельных ортоферритах для значений параметров материала, лежащих за рамками предельного случая, допускающего аналитическое решение. Определены закон разворота вектора намагниченности в такой ДГ, эффективные ширины ДГ и линии, энергия, приходящаяся на единицу длины линии. Показано, что более точный учет двумерности ДГ при использовании численных методов позволяет выявить существенные отличия в „тонкой“ структуре ДГ по сравнению со случаем использования приближенных аналитических методов.

Теоретически и экспериментально однородные доменные границы (ДГ) в редкоземельных ортоферритах (РЗО), являющихся неколлинеарными антиферромагнетиками со слабым ферромагнетизмом (химическая формула — $R\mathrm{FeO}_3$, где R — редкоземельный элемент), к настоящему времени изучены достаточно подробно (см., например, [1–8]). С другой стороны, в отличие от случая феррит-гранатов пока не найдено надежных способов зарождения, наблюдения и изучения „тонкой“ структуры ДГ в РЗО. Возможно, это связано с наличием в них большого значения плоскостной анизотропии, в обычных условиях препятствующей выходу векторов ферромагнетизма $\mathbf{m}$ и антиферромагнетизма $\mathbf{l}$ из плоскости их разворота в однородной ДГ. Поэтому теоретически [9] было предсказано, что более вероятно образование „тонкой“ структуры вблизи фазового перехода в самой ДГ или вблизи поверхности образца, где может измениться соотношение между константами анизотропии. В последнее время появились экспериментальные работы [10–14], результаты которых можно интерпретировать как наблюдение динамических линий на движущейся со сверхзвуковой скоростью неелевской ДГ в РЗО. Однако из этих экспериментов, вообще говоря, неясно, какой конкретно тип „тонкой“ структуры ДГ реализуется на практике.

Как известно [3], проблема теоретического описания „тонкой“ структуры ДГ в РЗО — это проблема решения системы связанных нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка (в предельном случае сводимых к уравнению sin-Gordon). Причем аналитических методов для их решения в общем случае пока не найдено. Для случая, когда $Q = \left|(K_{ab} - K_{cb})/K_{cb}\right| \gg 1$ (где K_{ab} и K_{cb} — эффективные константы анизотропии в плоскостях ab и bc соответственно), используя приближенные аналитические методы, было получено, что характеристики таких ДГ, представляющих собой чередование участков с поворотом и без поворота $\mathbf{m}$, должны существенно отличаться от характеристик ДГ с линиями Блоха в ферромагнетиках [15–17]. С другой стороны, имеется также много работ по исследованию двумерной структуры ДГ магнетиков с помощью численных методов. Например, большие успехи достигнуты для случая тонких магнитных пленок (см. обзор [18]). В данной работе с помощью численных методов для случая РЗО с положительным значением параметра Q изучается структура статической ДГ с линией Блоха.

Будем рассматривать бесконечную пластину РЗО, находящуюся в высокотемпературной магнитной фазе G_xF_z, в двухподрешеточной модели, состояние которой описывается двумя векторами намагниченности подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$, равными по модулю ($|\mathbf{M}_1| = |\mathbf{M}_2| = M_0$). Тогда вектора $\mathbf{m}$ и $\mathbf{l}$ можно определить как $\mathbf{m} = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)/2M_0$, $\mathbf{l} = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)/2M_0$. Считаем, что выполняются соотношения: $m^2 + l^2 = 1$, $(\mathbf{ml}) = 0$. Оси декартовых координат x, y, z будем считать ориентированными вдоль кристаллографических осей a, b, c соответственно. Плотность энергии магнитной подсистемы РЗО запишем в виде [3]

$$\omega = \frac{a}{2}\mathbf{m}^2 + \frac{a_1}{2}l_x^2 + \frac{a_3}{2}l_z^2 + d_1 m_x l_z - d_3 m_z l_x + \frac{A}{2}\left(\frac{\partial \mathbf{l}}{\partial x_\delta}\right)^2, \tag{1}$$

где a, A — соответственно константы однородного и неоднородного обмена; d_i, a_i — константы Дзялошинского и анизотропии; $\{x_\delta\} = x, y, z$. Для случая $|\mathbf{m}|^2 \ll |\mathbf{l}|^2 \approx 1$ можно вектор $\mathbf{m}$ выразить через $\mathbf{l}$ [4]

$$\mathbf{m} = \frac{1}{a}[\mathbf{ld}], \tag{2}$$

где $\mathbf{d} = d\mathbf{e}_y$, $d_1 = d_3 = d$. Тогда в угловых переменных $\mathbf{l} = \mathbf{l}(\cos\theta, \sin\theta\sin\varphi, \sin\theta\cos\varphi)$, уравнения, описывающие структуру ДГ в статическом случае имеют вид [9]

$$A\Delta\theta - \left(K_{ab} - K_{cb}\cos^2\varphi + A(\nabla\varphi)^2\right)\sin\theta\cos\theta = 0, \tag{3}$$

$$A\sin^2\theta\Delta\varphi - K_{cb}\sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi + 2A\sin\theta\cos\theta\nabla\theta\nabla\varphi = 0, \tag{4}$$

где $K_{ab} = \frac{d^2}{a} - a_1$, $K_{cb} = \frac{d^2}{a} - a_3$.

Рассмотрим с помощью численных методов двумерные решения системы уравнений (3)–(4) для случая неелевской ДГ с поворотом **m** (использовавшейся в экспериментах [10–14]). Плоскость ДГ параллельна плоскости yz, а вектора **m** и **l** в домене направлены вдоль осей z и x соответственно. Известное приближенное аналитическое решение системы уравнений (3)–(4) имеет вид [9]

$$\theta_0(x) = \operatorname{arctg}\big(\exp(x/\delta)\big), \tag{5}$$

$$\varphi_0(y) = \operatorname{arctg}\Big(\exp\big(y/Q^{1/2}\delta_0\big)\Big), \tag{6}$$

где $\delta = \delta_0\big(1 + 2Q^{-1}\sin^2\varphi_0\big)^{-1/2}$ — ширина ДГ, $\delta_0 = \sqrt{A/(K_{ab} - K_{cb})}$;

$$\theta_0(\pm\infty) = 0, \pi; \qquad \varphi_0(\pm\infty) = 0, \pi. \tag{7}$$

Выражение (5) описывает основную доменную структуру, а (6) — „тонкую“ структуру ДГ со 180° вертикальной линией Блоха.

Считаем теперь, что $\theta = \theta(x, y)$ и $\varphi = \varphi(x, y)$. Построенный алгоритм численного интегрирования системы уравнений (3)–(4) работал следующим образом: на первом шаге из уравнения (3) при заданных начальных значениях в виде (5)–(6) находилось новое решение $\theta_1(x, y)$, которое затем подставлялось в уравнение (4) для нахождения значения $\varphi_1(x, y)$. На следующем шаге процедура повторялась с использованием $\theta_1(x, y)$ и $\varphi(x, y)$ в качестве начальных значений. Счет велся до тех пор, пока не выполнялось условие $|\theta_n - \theta_{n-1}| < \varepsilon$, $|\varphi_n - \varphi_{n-1}| < \varepsilon$, где $\varepsilon = 0.0001$ rad. Для численного решения исходных уравнений использовался метод релаксации аналогично работе [19]. Численный расчет проводился с помощью использования сетки 100×100 ячеек. Заметим, что указанный алгоритм автоматически реализует минимум энергии линии, рассчитанной на единицу ее длины вдоль оси z

$$W_L = \frac{1}{2}\iint\limits_S \Big((\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\varphi)^2 + \sin^2\theta\big(1 + Q^{-1}\sin^2\varphi\big)\Big)dx\,dy - W_0\lambda, \tag{8}$$

где W_0 — энергия однородной ДГ, S — область интегрирования обычно выбирались в виде квадрата с размерами $10\delta_0 \times 10\delta_0$, λ — размер области интегрирования вдоль оси y.

В результате численных расчетов найдены искомые зависимости $\theta(x, y)$, $\varphi(x, y)$, из которых определялись „классические“ параметры (закон разворота намагниченности, ширина ДГ и линии, энергия полученной структуры и т.п.), определяющие вид структуры ДГ с линией Блоха для различных значений Q. На рис. 1 представлено полученное распределение вектора антиферромагнетизма в 180° неелевской ДГ с поворотом **m** с вертикальной линией, локализованной в точке (0, 0)

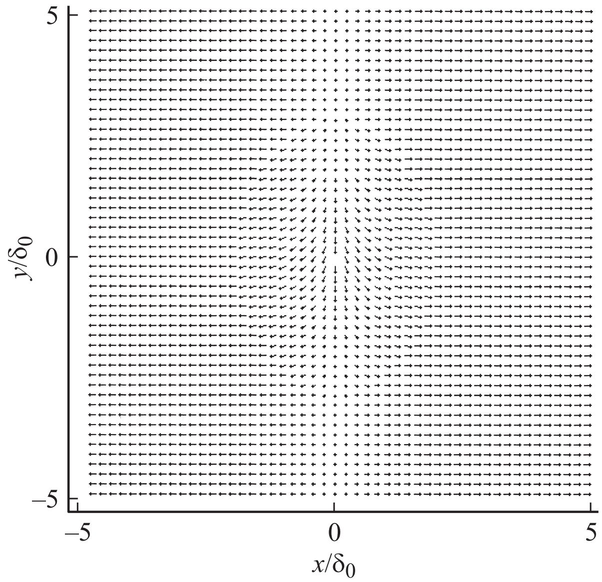

Рис. 1. Распределение вектора антиферромагнетизма в 180° неелевской ДГ с поворотом **m** с вертикальной линией, локализованной в точке $(0; 0)$ $(Q = 1)$.

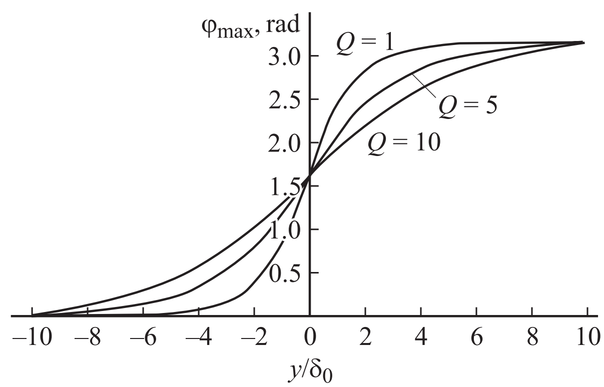

Рис. 2. Зависимость максимального угла $\varphi_{\max}$ выхода вектора антиферромагнетизма из ac-плоскости от координаты y.

для случая $Q = 1$. Схематически разворот **l** в такой ДГ можно описать следующим образом: вектор **l** выходит из ac-плоскости (своей плоскости разворота с однородной ДГ) с максимальным отклонением в центре ДГ, причем это отклонение φ увеличивается еще и с приближением к центру линии, где ДГ с поворотом **m** переходит в ДГ без поворота **m**. Зависимость максимального угла $\varphi_{\max}$ выхода **l** из ac-плоскости от координаты y для различных значений Q приведена на рис. 2.

Зависимость эффективной ширины ДГ (определяемая „классически“ по Лилли) от координаты y вдоль ДГ для случая разных значений Q приведена на рис. 3. Видно, что она существенно зависит от Q и сильно отличается от аналитической $\delta = \delta_0\big(1 + Q^{-1}\sin^2\varphi_0(y)\big)^{-1/2}$ при малых Q. Можно отметить также, что с уменьшением Q заметно уменьшается область ДГ, где она отличается от однородной, что хорошо согласуется с зависимостью эффективной ширины линии Λ в центре ДГ от парамет-

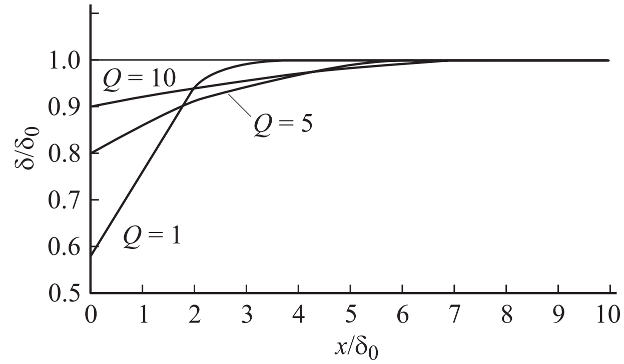

Рис. 3. Зависимость эффективной ширины ДГ от координаты y вдоль ДГ.

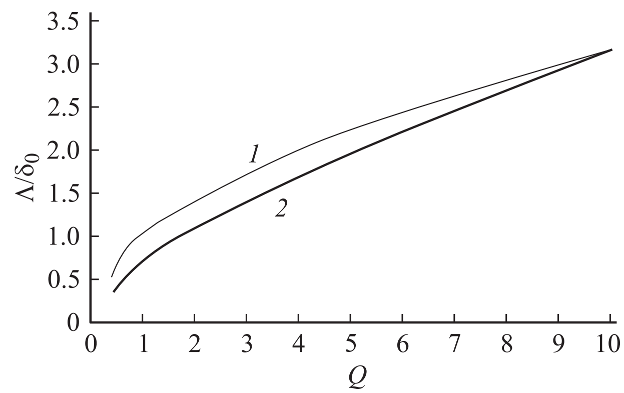

Рис. 4. Зависимость эффективной ширины линии Λ в центре ДГ от параметра Q. *1* — аналитическое решение, *2* — численное решение.

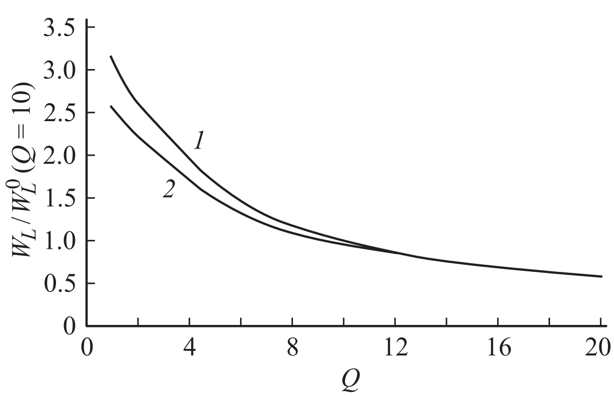

Рис. 5. Зависимость энергии W_L, приходящейся на единицу длины линии, нормированной на ее значение, найденное аналитически W_L^0. *1* — аналитическое решение, *2* — численное решение.

ра Q (рис. 4). Если в аналитическом случае $\Lambda/\delta_0 = Q^{1/2}$, то в нашем случае зависимость имеет практически линейный вид, начиная с $Q = 2$. Зависимость энергии W_L, приходящейся на единицу длины линии, нормированной на ее значение, найденное аналитически $W_L^0 = 4AQ^{-1/2}$ при $Q = 10$, приведена на рис. 5. Заметим, что, если при $Q \geq 10$ величина рассчитанной энергии практически совпадает с аналитической, при $Q = 1$ она уже на 19% меньше.

Из анализа результатов численных расчетов следует, что если для случая $Q \geq 10$ (область $Q \gg 1$, где хорошо работает аналитический метод) найденная численно структура ДГ с большой точностью совпадает с аналитической, то с уменьшением Q различие между ними значительно увеличивается. Также можно отметить, что найденные значения $\theta(x, y)$ и $\varphi(x, y)$ существенно двумерны в области локализации линии и эта двумерность увеличивается с уменьшением Q, приводя к значительным изменениям структуры ДГ с линией Блоха по сравнению с решением (5)–(6). Возможно, с этим связано то, что пока не удается полностью описать с помощью приближенных аналитических методов результаты некоторых экспериментов (например, зависимость скорости линии от скорости ДГ [14]), проведенных при комнатных температурах, когда значения Q в $YFeO_3$ могут быть даже меньше единицы [20], и тогда очевидно, что для адекватного описания динамики линий в РЗО оказывается важен более точный учет двумерности значения углов θ и φ.

Список литературы

[1] К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, М. (1980).
[2] А.Ф. Андреев, В.И. Марченко. УФН **130**, *1*, 39 (1980).
[3] М.М. Фарзтдинов. Физика магнитных доменов в антиферромагнетиках и ферритах. Наука, М. (1981).
[4] V.G. Barjaktar, M.V. Chetkin, B.A. Ivanov, S.N. Gadetskiy. Dynamics of topological magnetic solitons. Experiment and theory. Tracts in Modern Physics. Vol. 129. Springer–Verlag, Berlin (1994).
[5] А.К. Звездин, А.А. Мухин. ЖЭТФ **102**, *2*, 577 (1992).
[6] N. Papanicolau. Phys. Rev. B **55**, *18*, 55 (1997).
[7] М.А. Шамсутдинов, С.А. Ниязгулов. ФММ **85**, *6*, 23 (1998).
[8] V.S. Gerusimchuk, A.L. Sukstanskij. Phys. Rev. B **59**, *10*, 6966 (1999).
[9] М.М. Фарзтдинов, М.А. Шамсутдинов, А.А. Халфина. ФТТ **21**, 1522 (1979).
[10] M.V. Chetkin, Yu.N. Kurbatova, A.I. Akhutkina. J. Appl. Phys. **79**, *8*, 6132 (1996).
[11] М.В. Четкин, Ю.Н. Курбатова, А.И. Ахуткина, Т.Б. Шапаева. ЖЭТФ **115**, 2160 (1999).
[12] M.V. Chetkin, Yu.N. Kurbatova. Phys. Lett. A **260**, *108*, 127 (1999).
[13] М.В. Четкин, Ю.Н. Курбатова. ФТТ **43**, 1503 (2001).
[14] М.В. Четкин, Ю.Н. Курбатова, Т.Б. Шапаева. Письма в ЖЭТФ **73**, *6*, 334 (2001).
[15] Ю.В. Мелихов, О.А. Переход. УФН **28**, *5*, 713 (1983).
[16] М.М. Фарзтдинов, М.А. Шамсутдинов, Е.Г. Екомасов. ФТТ **30**, *6*, 1866 (1988).
[17] Е.Г. Екомасов, М.А. Шабалин. ФТТ **43**, *7*, 1211 (2001).
[18] Б.Н. Филиппов. ФНТ **28**, *10*, 991 (2002).
[19] А.Б. Борисов, А.П. Танкеев, А.Г. Шагалов. ФТТ **31**, *5*, 140 (1989).
[20] А.Э. Егоян, А.А. Мухин. Кратк. сообщ. по физике ФИАН **9-10**, 55 (1993).