# Поверхностные искажения магнитной структуры одноосного антиферромагнетика: фазовая диаграмма "магнитное поле—шероховатость"

© 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 30 января 2006 г.)

Методами математического моделирования исследованы искажения магнитной структуры, индуцированные внешним магнитным полем вблизи шероховатой поверхности одноосного коллинеарного антиферромагнетика. Получена фазовая диаграмма "магнитное поле-шероховатость" этих искажений. Показано, что в определенных условиях наличие на поверхности атомных ступеней ведет к разбиению поверхностного слоя антиферромагнетика на домены. В случае сильной шероховатости на поверхности формируются статические вихри и возникает 90° доменная стенка, параллельная поверхности антиферромагнетика.

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

Активное использование в современной магнитоэлектронике антиферромагнитных слоев нанометровой толщины делает актуальным рассмотрение поверхностных и размерных эффектов. Настоящая работа посвящена изучению искажений магнитной структуры, индуцированных магнитным полем вблизи шероховатой поверхности полубесконечного одноосного коллинеарного антиферромагнетика с легкой осью, лежащей в плоскости поверхности.

Случай атомно-гладкой поверхности был рассмотрен в предшествующей работе [1]. Если атомные плоскости, параллельные поверхности, являются некомпенсированными, а магнитное поле приложено антипараллельно намагниченности поверхностного слоя атомов, то в поле поверхностного спин-флоп перехода  $B_s$  вблизи поверхности антиферромагнетика, как это показало математическое моделирование [1], образуется 180° доменная стенка с весьма своеобразной структурой: в ней намагниченности второй и третьей, четвертой и пятой и т. д. атомных плоскостей (нумерация идет от поверхностного слоя атомов) попарно скомпенсированы. Намагниченность первого атомного слоя параллельна намагниченности последней четной атомной плоскости. Поэтому магнитный момент доменной стенки равен удвоенному моменту атомной плоскости.

Величина  $B_s$  равна  $B_s = B_1/\sqrt{2}$ , где  $B_1$  — поле объемного спин-флоп перехода [2,3]. Толщина доменной стенки расходится по мере приближения поля к полю объемного спин-флоп перехода.

Если же внешнее магнитное поле параллельно намагниченности верхнего атомного слоя, то каких-либо изменений магнитной структуры не происходит вплоть до поля объемного спин-флоп перехода. На шероховатой поверхности антиферромагнетика присутствуют атомные ступени высотой в один атомный слой. По разные стороны ступени верхний атомный слой принадлежит к различным подрешеткам антиферромагнетика (рис. 1). Таким образом, вся поверхность антиферромагнетика разбита границами ступеней на области первого и второго типа, тип области определяется номером подрешетки антиферромагнетика, к которой принадлежит верхний атомный слой.

Если характерный продольный размер ступеней R достаточно велик, то при приложении параллельно намагниченности первой подрешетки магнитного поля, величина которого B удовлетворяет неравенству  $B_s < B < B_1$ , магнитная структура областей первого типа останется неизменной, а в областях второго типа произойдет поверхностный спин-флоп переход. В результате поверхность разобьется на домены.

Вид поверхностных искажений магнитной структуры существенно зависит от соотношения между характерной шириной ступеней R и радиусом корреляции параметра порядка  $r_c$ . Сильная зависимость  $r_c$  от величины магнитного поля B и, в частности расходимость  $r_c$  при  $B \to B_1$ , ведет к возникновению достаточно сложной фазовой диаграммы искажений магнитной структуры в переменных "поле–шероховатость".

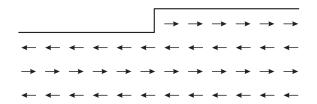


Рис. 1. Атомная ступень на поверхности антиферромагнетика.

### 2. Описание модели

Рассмотрим антиферромагнетик при температурах  $T \ll T_N \ (T_N$  — температура Нееля), когда модули намагниченностей подрешеток можно считать неизменными. Ограничимся рассмотрением локализованных квазиклассических спинов в приближении гейзенберовского обменного взаимодействия между ближайшими соседями.

Изучим срез (100) тетрагональной (с осью c, лежащей в плоскости поверхности) или ромбической объемноцентрованной решетки. Пронумеруем атомные плоскости, параллельные срезу, индексом n, начиная с самой верхней, присутствующей в образце с шероховатой поверхностью. Спины в четных и нечетных плоскостях принадлежат разным подрешеткам. Положение спина в плоскости слоя будет задаваться индексами i, j, определяющими узел прямоугольной решетки спинов атомной плоскости.

Энергия обменного взаимодействия спинов принимает вид

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

где  $J_{\rm af} < 0$  — интеграл обмена между ближайшими спинами;  $S_{\rm af}$  — величина спина атома;  $\mathbf{s}_{n,i,j}$  — единичный вектор, задающий направление соответствующего спина, индекс  $\boldsymbol{\delta}$  нумерует ближайших к данному спину соседей (рис. 2). Вдали от поверхности число ближайших соседей равно восьми.

Введем декартову ортогональную систему координат с осями, параллельными кристаллографическим, причем ось z направлена наружу перпендикулярно поверхности антиферромагнетика. Энергия одноосной анизотропии выражается как

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

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  $\theta_{n,i,j}$ ,

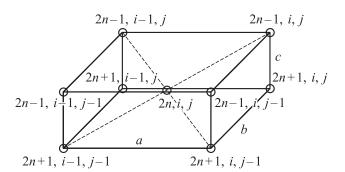
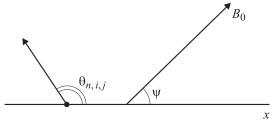


Рис. 2. Элементарная ячейка антиферромагнетика.



**Рис. 3.** Ориентация магнитных моментов атомов и внешнего магнитного поля относительно оси легкого намагничивания (ось x).

который соответствующий спину магнитный момент образует с легкой осью x, лежащей в плоскости (рис. 3). Прямой учет диполь-дипольного взаимодействия спинов и возникающих размагничивающих полей кардинально усложняет задачу и резко увеличивает время расчета.

Зеемановская энергия имеет вид

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

где  $\mu_B$  — магнетон Бора;  $B_0$  — индукция внешнего магнитного поля, направленного параллельно поверхности под углом  $\psi$  к легкой оси (рис. 3). Здесь учтено, что вектор спина антипараллелен вектору соответствующего ему магнитного момента. В дальнейшем ограничимся случаем  $\psi=0$ .

## 3. Результаты моделирования

3.1. Дискретная модель. Для нахождения равновесного распределения спинов проводилось моделирование их поведения на основе системы уравнений Ландау—Лифшица—Гильберта

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

где  $\mu$  — затухание, а

$$H_{\text{eff}}^p = -\frac{\partial W}{\partial s_{n,i,j}^p},\tag{5}$$

p=x,y,z; а W — суммарная энергия  $W=W_{\mathrm{ex}}+W_{\mathrm{an}}+W_{Z}.$ 

В качестве исходного выбиралось либо коллинеарное состояние антиферромагнетика, отвечающее минимуму энергии в отсутствие внешнего поля, либо однородное состояние, возникающее после объемного спин-флоп перехода. Решение системы уравнений (4) находилось "классическим" методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Приход к равновесию контролировался по поведению суммарной энергии системы.

Моделирование проводилось в случае, когда края ступеней параллельны оси y ортогональной системы координат, т.е. решалась двумерная задача с периодическими по x граничными условиями.

Результаты моделирования показали, что когда характерный размер ступеней R намного превосходит радиус корреляции антиферромагнитного параметра порядка  $r_c$ , в областях второго типа, для которых до приложения поля магнитный момент поверхностного слоя атомов был антипараллелен внешнему магнитному полю, в поле поверхностного спин-флоп перехода вблизи поверхности возникает  $180^\circ$  доменная стенка. Картина распределения антиферромагнитного параметра порядка вблизи края ступени изображена на рис. 4.

Введем два безразмерных параметра, описывающих анизотропию и внешнее поле

$$\alpha = \frac{K_{\parallel}}{|J_{\rm af}|} \ll 1, \tag{6}$$

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

Как показано в классической работе Нееля [4], поле объемного спин-флоп перехода  $\beta_1$  равно

$$\beta_1 = \sqrt{32\alpha}.\tag{8}$$

Следовательно [2,3],

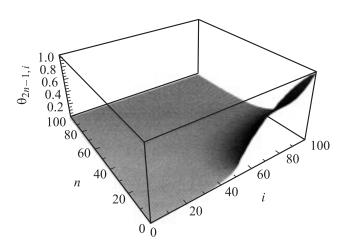
$$\beta_s = 4\sqrt{\alpha}.\tag{9}$$

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

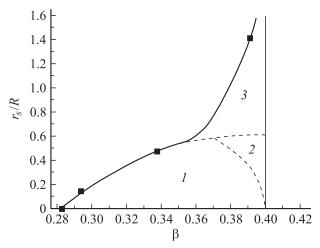
$$r_c = \frac{4}{\sqrt{|\beta_1^2 - \beta^2|}};\tag{10}$$

здесь и далее все расстояния даны в единицах соответствующих постоянных кристаллических решеток.

При  $\beta=\beta_s$   $r_s=r_c(\beta_s)=4/\beta_s=\alpha^{-1/2}$ . По мере уменьшения параметра R, но при  $R>r_s$  поле спинфлоп перехода в ограниченной области второго типа



**Рис. 4.** Ориентация магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток для  $R=100,~\alpha=0.007$  и  $\beta=0.295.$  Краю атомной ступени соответствует n=1,~i=R/2.



**Рис. 5.** Фазовая диаграмма "магнитное поле-шероховатость" в области полей  $\beta \leq \beta_1$  для случая  $\sigma_1 = \sigma_2$ . Сплошная линия является линией фазовых переходов первого рода из коллинеарной фазы в неколлинеарную. Цифрами обозначены области существования доменов (I), вихрей (2) и слабых искажений (3).

смещается в сторону более сильных магнитных полей (рис. 5). При  $R < r_s$  доменная стенка в отдельной области вообще не образуется.

При приближении внешнего поля к точке объемного спин-флоп перехода  $\beta_1$   $r_c \to \infty$ , поэтому даже в случае возникновения доменной фазы соотношение  $R > r_c$  нарушается по мере роста магнитного поля. Для области полей, в которой  $r_c \gg R$ , рассматриваемая задача сводится к решенной нами ранее задаче об искажениях параметров порядка на шероховатой границе раздела двухслойной системы ферромагнетик—антиферромагнетик [5]. Для демонстрации этого факта перейдем к континуальному приближению.

3.2. Континуальное приближение. Произведем замену переменных  $\tilde{\theta}_{2n-1,i,j} = \theta_{2n-1,i,j}$ ,  $\theta_{2n,i,j} = \pi + \tilde{\theta}_{2n,i,j}$ . В полях, много меньших поля спин-флип перехода (поле схлопывания подрешеток антиферромагнетика),

$$|\tilde{\theta}_1(x, y, z) - \tilde{\theta}_2(x, y, z)| \ll 1, \tag{11}$$

где  $\tilde{\theta}_1$  и  $\tilde{\theta}_2$  описывают спины, принадлежащие к первой и второй подрешеткам антиферромагнетика.

Минимизируя суммарную энергию  $W_{\rm ex}+W_{\rm an}+W_Z$  по переменным  $\tilde{\theta}_{n,i,j}$  и переходя к континуальному представлению в получившихся уравнениях, получаем с учетом неравенства (11) в объеме антиферромагнетика

$$\begin{cases} -8(\tilde{\theta}_1 - \tilde{\theta}_2) + \Delta \tilde{\theta}_2 = \alpha \sin 2\tilde{\theta}_1 + \beta \sin(\tilde{\theta}_1 - \psi) \\ 8(\tilde{\theta}_1 - \tilde{\theta}_2) + \Delta \tilde{\theta}_1 = \alpha \sin 2\tilde{\theta}_2 - \beta \sin(\tilde{\theta}_2 - \psi) \end{cases}, (12)$$

где  $\Delta$  — трехмерный лапласиан в безразмерных переменных  $\tilde{x}=\frac{x}{a},~\tilde{y}=\frac{y}{b},~\tilde{z}=\frac{z}{c}.$  Вводя переменные  $\theta=\frac{\tilde{\theta}_1+\tilde{\theta}_2}{2}$  и  $\varphi=\tilde{\theta}_2-\tilde{\theta}_1\ll 1$ , находим, складывая и

вычитая уравнения (12),

$$\Delta\theta = \alpha \sin 2\theta - \beta \frac{\varphi}{2} \cos(\theta - \psi), \tag{13}$$

$$16\varphi + \Delta\varphi = 2\beta \sin(\theta - \psi). \tag{14}$$

В (13) и (14) мы учли, что  $\alpha, \varphi \ll 1$  и пренебрегли слагаемыми, содержащими вторую и более высокие степени этих параметров.

В случае когда размеры магнитных неоднородностей намного превышают атомные размеры, можно пренебречь  $\Delta \varphi$  в уравнении (14). Тогда из (14) находим

$$\varphi = \frac{\beta}{8}\sin(\theta - \psi). \tag{15}$$

Подставляя значение  $\varphi$  в (13), получаем

$$\Delta\theta = \alpha \sin 2\theta - \frac{\beta^2}{32} \sin(2\theta - 2\psi). \tag{16}$$

В интересующем нас случае  $\psi=0$  имеем

$$\Delta\theta = \frac{\beta_1^2 - \beta^2}{32} \sin 2\theta. \tag{17}$$

Рассмотрим теперь ситуацию на границе антиферромагнетика. Если верхним является атомный слой, принадлежащий первой подрешетке, то в результате перехода к континуальному представлению в уравнении для спина, принадлежащего этому слою, получаем

$$8(\tilde{\theta}_{2} - \tilde{\theta}_{1}) - 4\frac{\partial \tilde{\theta}_{2}}{\partial \tilde{z}} + \Delta_{\tilde{x},\tilde{y}}\tilde{\theta}_{2}$$

$$= 2\alpha \sin 2\tilde{\theta}_{1} + 2\beta \sin(\tilde{\theta}_{1} - \psi), \qquad (18)$$

где  $\Delta_{\tilde{x},\tilde{y}}$  — двумерный лапласиан в плоскости слоя. Если же верхним является слой, принадлежащий второй подрешетке, то на границе имеем

$$-8(\tilde{\theta}_{2} - \tilde{\theta}_{1}) - 4\frac{\partial \tilde{\theta}_{1}}{\partial \tilde{z}} + \Delta_{\tilde{x},\tilde{y}}\tilde{\theta}_{1}$$

$$= 2\alpha \sin 2\tilde{\theta}_{2} - 2\beta \sin(\tilde{\theta}_{2} - \psi). \tag{19}$$

Используя непрерывность  $\varphi$ , получаем после перехода к переменным  $\theta$  и  $\varphi$  и подстановки (15) в (18), (19)

$$-4\frac{\partial\theta}{\partial\tilde{z}} + \Delta_{\tilde{x},\tilde{y}}\theta = \pm\beta\sin(\theta - \psi), \tag{20}$$

где знаки плюс и минус в правой части отвечают случаю верхней нечетной и четной атомной плоскости соответственно.

Для произвольной кристаллической решетки коэффициент при производной  $\frac{\partial \theta}{\partial \bar{z}}$  равен чисту ближайших соседей, расположенных в соседней атомной плоскости. В частности, для (100) среза простой кубической решетки он равен единице.

3.3. Окрестность поля  $\beta_1$ . В случае когда характерный размер ступеней R намного меньше, чем радиус корреляции параметра порядка, можно пренебречь правой частью уравнения (17), которая обращается в нуль при  $\beta = \beta_1$ . В результате уравнение переходит в уравнение Лапласа.

Возникающая задача решения этого уравнения с граничным условием (20) при  $\psi=0$  полностью аналогична задаче об искажениях параметров порядка на шероховатой границе раздела двухслойной системы ферромагнетик—антиферромагнетик [5,6], если предположить, что ферромагнетик является абсолютно жестким по отношению к магнитным искажениям, а межслойный обмен заменить на магнитное поле  $\beta$ .

Как показывает расчет, вблизи поверхности антиферромагнетика формируются захватывающие область |z| < R статические спиновые вихри, границы которых на поверхности антиферромагнетика совпадают с краями атомных ступеней. При этом наряду с характерным размером R существует второй характерный размер  $\delta_0$  — ширина поверхностной области вблизи атомной ступени, в которой значение  $\theta_{n,i,j}$  существенно отличается от своего оптимального значения (соответственно 0 и  $\pi$  по разные стороны ступени).

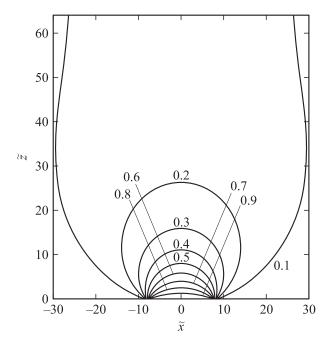
Оценим величину  $\delta_0$  в случае  $R\gg\delta_0$  из энергетических соображений. Тот факт, что в области шириной  $\delta_0$  намагниченность верхнего атомного слоя не совпадает с направлением магнитного поля, ведет к проигрышу в зеемановской энергии (здесь и далее в единицах  $|J_{\rm af}|S_{\rm af}^2/ab$ ) порядка  $\beta\delta_0a$  на единицу длины атомной ступени. Проигрыш в энергии анизотропии  $\alpha\delta_0a$  пренебрежимо мал по сравнению с ним.

В области  $\delta_0 < \rho < R$ , где  $\rho$  — кратчайшее расстояние от точки до края ступени на поверхности антиферромагнетика,  $|\nabla \theta|$  обратно пропорционален  $\rho$ . В этой области вклад искажений антиферромагнитного параметра порядка в обменную энергию составляет величину порядка  $a \ln \frac{R}{\delta_0}$  в расчете на единицу длины атомной ступени [5–7]. Минимизируя суммарную энергию по параметру  $\delta_0$ , находим  $\delta_0 \sim \beta^{-1}$ , и в области  $\beta \sim \beta_1$  величина  $\delta_0 \sim r_s$ .

В случае  $R \gg \delta_0$  величина  $\theta$  на поверхности антиферромагнетика посередине между ступенями равна 0 или  $\pi$  соответственно (рис. 6).

В противоположном случае  $R \ll \delta_0$  разворот намагниченности не успевает произойти. Это область слабых искажений. Отклонения  $\theta$  от усредненного по поверхности значения содержат малый параметр  $R^2/\delta_0^2$ .

Как уже отмечалось, ступени разбивают всю поверхность антиферромагнетика на области двух типов с суммарными площадями  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  соответственно. Если среднее значение  $\theta$  в области  $R \ll |z| \ll r_c$  равно  $\xi$ , в вихре, занимающем область первого типа, происходит изменение  $\theta$  от нуля до  $\xi$ , в то время как у вихрей в областях второго типа  $\theta$  изменяется от  $\xi$  до  $\pi$ .



**Рис. 6.** Статический спиновый вихрь вблизи поверхности антиферромагнетика. На линиях постоянного значения угла  $\theta$  указана величина в единицах  $\pi$ . Краям атомных ступеней соответствует  $\tilde{x}=\pm 8,\, \tilde{z}=0.$ 

По аналогии с моделью "магнитной близости" Слончевского [8] суммарную энергию вихрей можно записать в виде

$$W = C_1 \xi^2 + C_2 (\pi - \xi)^2, \tag{21}$$

где

$$C_k = \sigma_k / R. \tag{22}$$

В случае  $\sigma_1=\sigma_2$  минимуму энергии вихрей соответствует  $\xi=\frac{\pi}{2}.$ 

Таким образом, для уменьшения энергии вихрей необходимо возникновение  $\xi$ -градусной доменной стенки вблизи поверхности антиферромагнетика. С ее появлением связана дополнительная поверхностная энергия w, которая по порядку величины равна

$$w = \xi^2 \sqrt{\beta_1^2 - \beta^2} \tag{23}$$

и обращается в нуль при  $\beta \to \beta_1$ . В рассматриваемой области полей, в случае когда  $\delta_0 \ll R \ll r_c$ , выигрыш в энергии вихрей намного превосходит проигрыш в энергии за счет образования доменной стенки. Распределение параметра порядка в случае  $R \sim \delta_0$  приведено на рис. 7.

При  $r_s \ll R$  переход из доменной фазы в вихревую происходит непрерывно в поле  $\beta$ , для которого  $r_c(\beta) \sim R$ , т.е. при

$$\tau_{\beta} \equiv 1 - \frac{\beta}{\beta_1} \sim \frac{r_s^2}{R^2}.\tag{24}$$

Фазовая диаграмма "магнитное поле—шероховатость" для  $\beta < \beta_1$  изображена на рис. 5.

Для  $R \ll r_s$  фазовый переход из коллинеарного состояния происходит сразу в фазу со слабыми искажениями. Характерный выигрыш в энергии за счет их возникновения можно оценить следующим образом (аналогично тому, как это сделано в [9]): добавка к зеемановской энергии на единицу поверхности составляет по порядку величины

$$w_Z \sim -\beta \eta \sin \xi + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_1 + \sigma_2} \beta \cos \xi,$$
 (25)

где  $\eta$  — амплитуда угловых отклонений антиферромагнитного параметра порядка на поверхности от среднего значения  $\theta = \xi$ . Возрастание обменной энергии за счет возникновения искажений характеризуется величиной порядка  $w_{\rm ex} = \eta^2/R$ . Минимизация суммарной энергии по параметру  $\eta$  дает

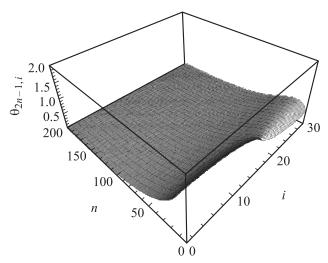
$$\eta \sim R\beta \sin \xi$$
 (26)

и добавку к энергии

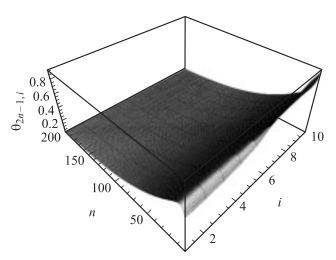
$$w = w_{\rm ex} + w_Z \sim -\beta^2 R \sin^2 \xi - \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_1 + \sigma_2} \beta \cos \xi.$$
 (27)

Сравнивая (27) с энергией доменной стенки (23), находим значение  $\tau_{\beta}$ , при котором становится выгодным переход от коллинеарного состояния  $\xi=0$  к состоянию с  $\xi\neq0$ ,  $\pi$  и слабыми поверхностными искажениями или (при  $\sigma_2>\sigma_1$ ) к состоянию с  $\xi=\pi$  без поверхностных искажений.

При малых  $\xi$  оба выражения квадратичны по  $\xi$ , и, как показывает моделирование для случая  $\sigma_2 = \sigma_1$  в рамках дискретной модели, переход из коллинеарной фазы в фазу с доменной стенкой и слабыми искажениями является поверхностным фазовым переходом первого



**Рис. 7.** Ориентация магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток для  $R=30,~\alpha=0.007$  и  $\beta=0.39$ . Краю атомной ступени соответствует n=1,~i=R/2.



**Рис. 8.** Ориентация магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток для  $R=10,~\alpha=0.007$  и  $\beta=0.395$ . Краю атомной ступени соответствует n=1,~i=R/2.

рода, происходящим при  $au_{eta} = au_{eta}^*$ 

$$\tau_{\beta}^* \sim \left(\frac{R}{r_s}\right)^2 \ll 1.$$
(28)

Распределение антиферромагнитного параметра порядка при  $R < r_s$  и  $\tau_{\beta} < \tau_{\beta}^*$  приведено на рис. 8.

3.4. Область полей  $\beta>\beta_1$ . В этой области полей, когда спин-флоп переход в объеме антиферромагнетика уже произошел, поведение поверхностных искажений практически одинаково при всех значениях R. Поскольку  $r_c\to\infty$  при  $\beta\to\beta_1+0$ , вблизи поля  $\beta_1$  система находится в вихревой фазе или фазе слабых искажений, а поверхностные искажения проникают внутрь антиферромагнетика на глубину порядка R. При этом в случае  $\sigma_2=\sigma_1$  доменная стенка на поверхности не возникает.

По мере роста поля  $r_c$  убывает согласно формуле (10), а величина  $\delta_0$  изменяется как  $\beta^{-1}$ . При  $\beta \geq 1$  и не слишком близко к полю схлопывания подрешеток  $\beta_2$  это величины одного порядка и сравнимы с постоянной решетки.

В поле  $\tilde{\beta}$ , для которого  $r_c(\tilde{\beta})=R\gg \delta_0(\tilde{\beta})$ , происходит плавный переход к доменной фазе, где в областях двух типов образуются почти  $90^\circ$  доменные стенки с противоположным направлением вращения антиферромагнитного параметра порядка (от  $\theta=0$  на поверхности к  $\theta=90^\circ$  в объеме в области первого типа и от  $\theta=180^\circ$  на поверхности к  $\theta=90^\circ$  в объеме в области второго типа). Для поля  $\tilde{\beta}$  получаем оценку

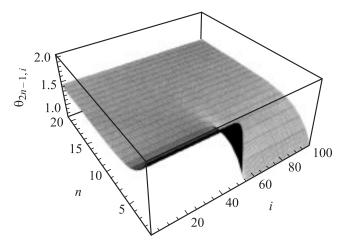
$$\tilde{\tau} = \frac{\tilde{\beta}}{\beta_1} - 1 \sim \frac{r_s^2}{4R^2}.\tag{29}$$

С ростом поля намагниченность верхнего слоя атомов разворачивается, отклоняясь от направления магнитного

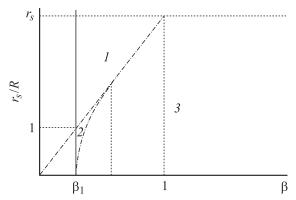
поля и приближаясь к направлению намагниченности соответствующей подрешетки в объеме. Угол разворота в доменной стенке падает, а ее толщина убывает вплоть до поля  $\beta^* = \beta_2/\sqrt{2}$  [1]. При дальнейшем возрастании поля она начинает увеличиваться, расходясь корневым образом при приближении к полю схлопывания подрешеток антиферромагнетика.

При  $\beta_2 > \beta > \beta^*$  разворот антиферромагнитного параметра порядка в областях разного типа в отличие от диапазона полей  $\beta_1 < \beta < \beta^*$  имеет один знак, поэтому контраст между областями пропадает, и дальнейшая эволюция поверхностных искажений аналогична случаю гладкой поверхности, изученному в [1].

Если же  $R < \delta_0(\beta)$ , наблюдаются только слабые поверхностные искажения. Распределение антиферромагнитного параметра порядка при  $R > r_c$ ,  $\delta_0$  для  $\beta^* > \beta > \beta_1$  и фазовая диаграмма этой области приведены соответственно на рис. 9 и 10.



**Рис. 9.** Ориентация магнитных моментов атомов одной из антиферромагнитных подрешеток вблизи края атомной ступени для R=100,  $\alpha=0.007$  и  $\beta=2$ . Краю атомной ступени соответствует n=1, i=R/2.



**Рис. 10.** Фазовая диаграмма "магнитное поле–шероховатость" в области полей  $\beta > \beta_1$  для случая  $\sigma_1 = \sigma_2$ . Цифрами обозначены области существования слабых искажений (I), вихрей (2) и доменов (3).

#### 4. Заключение

Таким образом, получена фазовая диаграмма "магнитное поле-шероховатость" для некомпенсированной поверхности коллинеарного одноосного антиферромагнетика и найден характер поверхностных искажений антиферромагнитного параметра порядка в каждой области фазовой диаграммы.

В частности показано, что в зависимости от соотношения между тремя характерными длинами R,  $r_c$  и  $\delta_0$  в результате поверхностного спин-флоп перехода первого рода реализуется одно из следующих состояний:

- 1) состояние, в котором поверхность антиферромагнетика разбита на домены  $(R \gg r_c, \delta_0)$ ;
- 2) состояние со статическими 90° поверхностными спиновыми вихрями и доменной стенкой  $(r_c \gg R \gg \delta_0)$ ;
- 3) состояние со слабыми поверхностными искажениями и доменной стенкой  $(r_c \gg \delta_0 \gg R)$ .

Переход между состояниями происходит плавно по мере изменения параметров системы.

В полях, превосходящих поле объемного спин-флоп перехода, в зависимости от соотношения между  $R, r_c$  и  $\delta_0$  реализуются состояния, аналогичные указанным выше, но в последних двух состояниях в случае  $\sigma_2 = \sigma_1$  доменная стенка не возникает.

Остановимся теперь на возможности экспериментального обнаружения этих искажений. В доменной фазе поверхностный магнитный момент и ориентации спинов верхнего слоя атомов одинаковы в областях обоих типов. Поэтому методами магнитной микроскопии можно идентифицировать только границы между областями, совпадающие с атомными ступенями. На границе областей магнитный момент и ориентация намагниченности отличаются от своих значений в центре области (намагниченность, в частности, перпендикулярна легкой оси). Ширина переходной области в зависимости от величины анизотропии составляет 10–100 nm и при  $\beta \leq \beta_1$  совпадает по порядку величины с шириной доменной стенки в отсутствие магнитного поля.

Фазу со слабыми искажениями легко идентифицировать по развороту средней намагниченности поверхностного слоя атомов от направления магнитного поля и оси легкого намагничивания.

Авторы благодарны 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**, 1651 (2005).
- [2] D.L. Mills. Phys. Rev. Lett. 20, 18 (1968).
- [3] F. Keffer, H. Chow. Phys. Rev. Lett. 31, 1061 (1973).
- [4] L. Neel. Ann. Phys. 5, 232 (1936).
- [5] В.Д. Левченко, А.И. Морозов, А.С. Сигов, Ю.С. Сигов. ЖЭТФ 114, 1903 (1998).

- [6] В.Д. Левченко, А.И. Морозов, А.С. Сигов. Письма в ЖЭТФ 71, 544 (2000).
- [7] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ 46, 385 (2004).
- [8] J.C. Slonczewski. J. Magn. Magn. Mater. 150, 13 (1995).
- [9] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ 39, 1244 (1997).