*Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 4*

*05*

# Фазовый переход полидоменное состояние–монодоменное состояние с обменными спиралями в антиферромагнитной прослойке спин-вентильной структуры

© *А.И. Морозов, Д.О. Рынков*

Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики,
Москва, Россия

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

*(Поступила в Редакцию 28 сентября 2011 г.)*

Методами математического моделирования исследован фазовый переход полидоменное состояние–монодоменное состояние с обменными спиралями в антиферромагнитной прослойке спин-вентильной структуры ферромагнетик–антиферромагнетик–ферромагнетик, происходящий по мере роста отношения толщины прослойки к ширине атомных ступеней на границах раздела слоев. В широком диапазоне значений константы одноионной анизотропии определены критическое значение указанного отношения, при котором происходит фазовый переход, и величина прогиба обменных спиралей, возникающих на границах раздела слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11-02-12241-офи-м-2011).

## 1. Введение

Магнитные спин-вентильные структуры с эффектом гигантского или туннельного магнетосопротивления нашли широкое применение в считывающих головках жестких дисков, сенсорах магнитного поля и в магниторезистивной памяти. Поэтому исследование их свойств представляет как фундаментальный, так и прикладной интерес.

Развитие технологий позволяет изготавливать структуры, в которых ширина атомных ступеней $R$ на границах раздела слоев составляет десятки-сотни нанометров и превосходит толщину традиционных доменных стенок в используемых материалах. В этих условиях, как было показано в работе [1], необходимы выход за рамки обменного приближения и учет энергии одноионной анизотропии. Для уменьшения числа параметров в этой работе рассматривался случай равной толщины слоев в спин-вентильной системе и была рассчитана магнитная фазовая диаграмма спин-вентильной структуры ферромагнетик–антиферромагнетик–ферромагнетик в переменных толщина слоев–ширина ступеней на границах раздела. Исследовалась система с анизотропией типа легкая ось с легкой осью, лежащей в плоскости слоев.

Наличие атомных ступеней на границах раздела ведет к фрустрации обменного взаимодействия между ферромагнитными слоями в случае, когда атомные плоскости антиферромагнетика, параллельные границам раздела, являются нескомпенсированными, т. е. содержат атомы только одной из двух подрешеток коллинеарного антиферромагнетика (см., например, обзоры [2,3]). Действительно, по одну сторону края атомной ступени число атомных плоскостей в слое антиферромагнетика четно, а по другую — нечетно. В случае нечетного числа нескомпенсированных плоскостей антиферромагнетика спины ферромагнитных слоев взаимодействуют с ближайшими к ним спинами антиферромагнетика, принадлежащими одной и той же подрешетке (рис. 1, $a$). При любом знаке обменного интеграла $J_{\mathrm{f,af}}$ между соседними спинами, расположенными в различных слоях, энергетически выгодной является параллельная ориентация намагниченностей ферромагнитных слоев. Если же число атомных плоскостей в антиферромагнитном слое четно, то спины ферромагнитных слоев взаимодействуют с ближайшими к ним спинами антиферромагнетика, принадлежащими к различным подрешеткам, и энергетически выгодной является антипараллельная ориентация намагниченностей ферромагнитных слоев (рис. 1, $b$). Налицо фрустрация, порожденная атомной ступенью.

Таким образом, атомные ступени на обеих границах раздела разбивают плоскость, параллельную слоям, на области двух типов: в областях первого типа энергетически выгодной является параллельная ориентация намагниченностей ферромагнитных слоев, а в областях второго типа — антипараллельная. В области больших значений $R$ фрустрации приводят к разбиению ферромагнитных слоев на домены.

В [1] было показано, что в области толщин слоев $a > \Delta_{\mathrm{af}}$ ($\Delta_{\mathrm{af}}$ — толщина традиционной доменной стенки в антиферромагнетике), при выполнении условия

$$\gamma^{1/2} a > R > \Delta_{\mathrm{af}}, \tag{1}$$

где $\gamma$ — отношение энергий обменного взаимодействия в ферро- и антиферромагнетике, ферромагнитные слои остаются монодоменными, а в антиферромагнитной прослойке реализуется одно из двух возможных состояний: полидоменное состояние с 180° доменами или фаза, в которой антиферромагнитная прослойка остается в монодоменном состоянии, а вблизи границ раздела ферромагнетик–антиферромагнетик формируются обменные спирали (рис. 2 и 3 соответственно). Переход между фазами имеет место при некотором критическом значении отношения $a/R$. В работе [1] оно было оценено как $(3/4)^{1/2}$ в предположении, что энергия обменной спирали на границе раздела слоев равна энергии блоховской доменной стенки в антиферромагнетике. При этом не учитывался тот факт, что обменная спираль выгнута в сторону антиферромагнитного слоя.

Действительно, вследствие того что энергия неоднородности параметра порядка меньше в антиферромагнетике, чем в ферромагнетике, обменная спираль стремится расположиться целиком в антиферромагнитном слое. Однако ее края должны совпадать с краями соседних атомных ступеней на границе раздела. Поэтому смещение средней части обменной спирали в антиферромагнетик сопровождается ростом ее поверхности и, следовательно, поверхностной энергии. Поведение обменной спирали аналогично поведению упругой мембраны, закрепленной на краях и находящейся в потенциальном рельефе.

Настоящая работа посвящена исследованию прогиба возникающих обменных спиралей и уточнению параметра $a/R$, соответствующего фазовому переходу в антиферромагнитной прослойке.

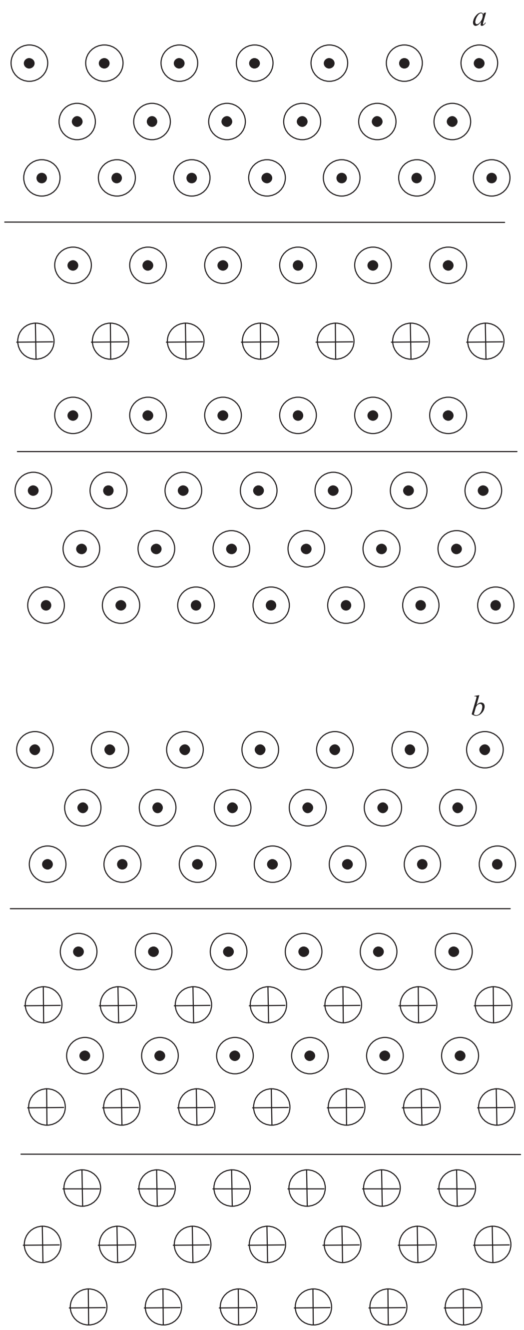


**Рис. 1.** Ориентация спинов, отвечающая минимуму энергии, в случае нечетного ($a$) и четного ($b$) числа атомных плоскостей в антиферромагнитной прослойке.

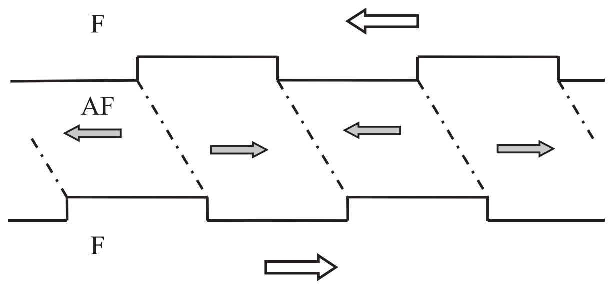


**Рис. 2.** Полидоменное состояние антиферромагнитной прослойки. Стрелки указывают направление параметров порядка. Сплошными линиями показаны границы раздела слоев, штрихпунктирными — доменные стенки.

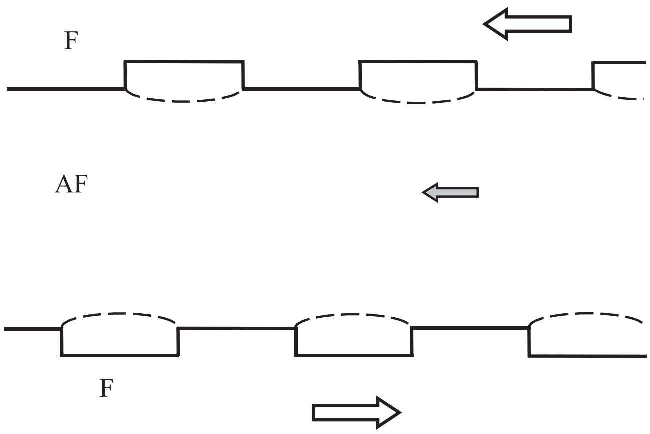


**Рис. 3.** Обменные спирали, параллельные границам раздела, в антиферромагнитной прослойке (штриховые линии). Остальные обозначения аналогичны приведенным на рис. 2.

## 2. Описание модели

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

$$W_{ij}^{\text{ex}} = -J_{ij}(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j), \quad (2)$$

где обменный интеграл $J_{ij}$ принимает в ферромагнетике значение $J_{\text{f}} > 0$, а в антиферромагнетике — значение $J_{\text{af}} < 0$, а на границе раздела — значение $J_{\text{f,af}}$. В дальнейшем ограничимся рассмотрением случая $|J_{\text{af}}| \ll J_{\text{f}}$. В противном случае искажения параметра порядка в антиферромагнитной прослойке практически отсутствуют, и задача сводится к задаче об искажениях параметра порядка в ферромагнитной пленке на жесткой антиферромагнитной подложке, рассмотренной в работе [4]. Будем также предполагать, что $J_{\text{f,af}}$ и $J_{\text{af}}$ одного порядка величины. В этом случае ширина области вблизи края атомной ступени на границе раздела ферромагнетик–антиферромагнетик, в которой относительная ориентация спинов ферро- и антиферромагнетика существенно отличается от параллельной, порядка межатомного расстояния [2,3]. При этом область слабых искажений магнитных параметров порядка на фазовой диаграмме отсутствует.

Будем считать, пренебрегая различием постоянных кристаллических решеток ферро- и антиферромагнетика, что кристаллические решетки слоев являются продолжением друг друга и что поверхность слоев соответствует срезу (100) тетрагональной объемно центрированной решетки с осью легкого намагничивания $c$, лежащей в плоскости слоя.

Введем декартову ортогональную систему координат с осями, параллельными кристаллографическим, причем ось $x$ параллельна легким осям слоев, а ось $z$ направлена перпендикулярно слоям. Для уменьшения числа параметров константы одноионной анизотропии слоев предполагались одинаковыми. С учетом этого энергия анизотропии имеет вид

$$W_{\text{an}} = K_{\perp} \sum_{i \in \text{f}} \left(s_i^{(z)}\right)^2 - K_{\parallel} \sum_{i} \left(s_i^{(x)}\right)^2, \quad (3)$$

где $K_{\parallel} > 0$ — константа одноосной анизотропии, $K_{\perp} > 0$ — константа поверхностной анизотропии ферромагнетика, введенная для того, чтобы учесть энергетическую невыгодность состояний, в которых намагниченность имеет $z$-составляющую, перпендикулярную поверхности. Прямой учет диполь-дипольного взаимодействия спинов и возникающих размагничивающих полей кардинально усложняет задачу и резко увеличивает время расчета.

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

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

где $\mu$ — затухание,

$$H_{\text{eff}}^{p} = -\frac{\partial W}{\partial s_i^{p}}, \quad (5)$$

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

Решение системы уравнений (4) находилось „классическим“ методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Приход к равновесию контролировался по поведению суммарной энергии системы.

В реальном кристалле разброс по ширине ступеней $R$ приводит к размытию исследуемого нами фазового перехода первого рода. Поэтому для выявления отвечающих этому переходу параметров нами была рассмотрена идеализированная система, в которой параллельные оси $y$ ортогональной системы координат атомные ступени на каждой границе раздела расположены периодически с периодом $R$, причем четные ступени приводят к возрастанию, а нечетные — к уменьшению толщины прослойки на одну атомную плоскость (рис. 2). Ступени на противоположных границах прослойки сдвинуты относительно друг друга по оси $x$ на расстояние $R/2$. Таким образом, решалась двумерная задача с периодическими по $x$ граничными условиями.

## 3. Результаты моделирования

Как показало моделирование, в полидоменной фазе параллельные друг другу доменные стенки соединяют края ступеней на противоположных границах прослойки. Их длина $L$ в плоскости $xz$ равна $\sqrt{R^2/4 + a^2}$. На расстоянии порядка $\Delta_{\text{af}} = \sqrt{2|J_{\text{af}}|/K_{\parallel}}$ от краев атомных ступеней, огранчивающих доменную стенку, толщина последней возрастает от межатомного расстояния до величины порядка $\Delta_{\text{af}}$, а на остальной площади стенка представляет собой традиционную доменную стенку. При этом намагниченности ферромагнитных слоев однородны и коллинеарны. Здесь и далее размеры даны в единицах соответствующих постоянных кристаллической решетки.

Легко понять, что доменной границе в антиферромагнетике энергетически выгодно соединять ступени на противоположных границах слоя, только если параметр $L/R$ не превосходит некоторое критическое значение $\xi$. При $L/R > \xi$ искажения антиферромагнитного параметра порядка имеют вид обменных спиралей, сосредоточенных вблизи границ раздела слоев, а объем антиферромагнетика находится в монодоменном состоянии. Взаимодействие между ферромагнитными слоями становится слабым, и главную роль играет энергия взаимодействия между соседними слоями.

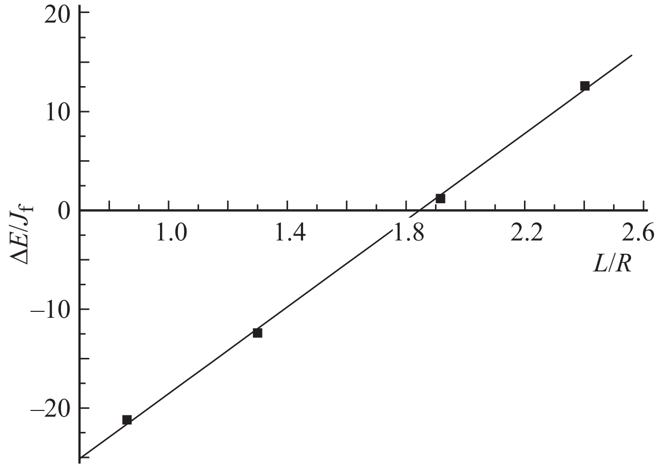


**Рис. 4.** Зависимость разности энергий полидоменной и монодоменной фаз от параметра $L/R$ для случая $J_{\rm af}/J_{\rm f} = -0.1$, $J_{\rm f,af}/J_{\rm f} = -0.1$, $K_{\|}/J_{\rm f} = 0.01$, $R = 200$.

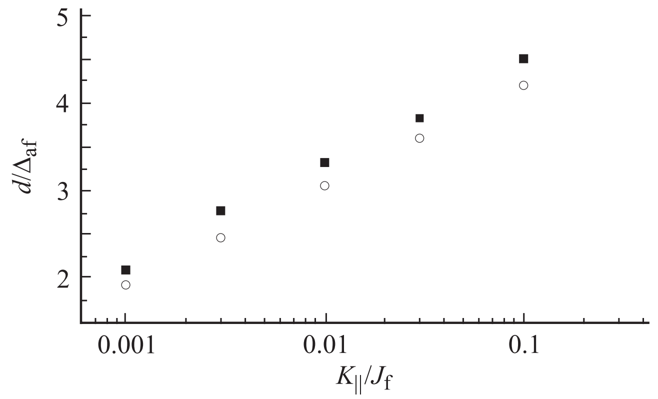


**Рис. 5.** Зависимость прогиба обменной спирали от константы анизотропии: результаты численного моделирования в случае $J_{\rm af}/J_{\rm f} = -0.1$, $J_{\rm f,af}/J_{\rm f} = -0.1$, $R = 200$ — квадраты; и расчет в рамках аналитической модели — круги.

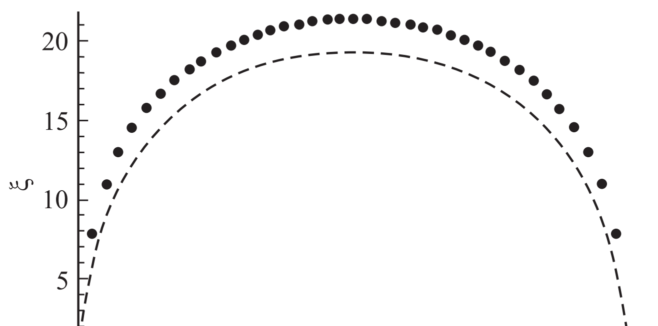


**Рис. 6.** Форма статической обменной спирали: результаты численного моделирования в случае $J_{\rm af}/J_{\rm f} = -0.1$, $J_{\rm f,af}/J_{\rm f} = -0.1$, $K_{\|}/J_{\rm f} = 0.01$, $R = 200$ (точки) и расчет в рамках аналитической модели (штриховая линия).

В отличие от случая обменных спиновых спиралей, возникающих в процессе перемагничивания двухслойной структуры жесткий ферромагнетик–мягкий ферромагнетик [5–7], исследуемые спиновые спирали возникают в отсутствие магнитного поля вследствие фрустраций и отвечают равновесному, а не метастабильному (как в системе жесткий ферромагнетик–мягкий ферромагнетик) состоянию. В обменной спирали происходит совокупный разворот параметров порядка на угол $\pi$. Пусть функция $\xi(x)$ задает множество точек обменной спирали, в которых угол $\theta_{\rm af} = \pi/2$, а максимальное значение $\xi(x)$ — это прогиб обменной спирали $d$.

Поскольку исследуемый фазовый переход является переходом первого рода, полидоменная фаза и монодоменная фаза с обменными спиралями сосуществуют в широком диапазоне толщин слоев. Была рассчитана полная энергия спин-вентильной структуры в указанных фазах. Реализация той или иной фазы обеспечивалась соответствующим выбором начального распределения спинов. Зависимость разности энергий поли- и монодоменной фаз от отношения $L/R$ изображена на рис. 4. Легко видеть, что фазовому переходу соответствует значение $\xi = 1.84$, а не $\xi = 1$, как это предполагалось первоначально [1]. Изменение константы анизотропии $K_{\|}$ в диапазоне $0.001J_{\rm f}$–$0.1J_{\rm f}$ приводило к изменению $\xi$ не более чем на 10%.

Полученные в результате моделирования зависимость прогиба обменной спирали от константы анизотропии и форма обменной спирали изображены на рис. 5 и 6 соответственно.

## 4. Аналитическая модель

Для аналитического исследования формы обменной спирали на границе раздела слоев рассмотрим следующую упрощенную модель. В силу неравенства $d \ll R$ можно считать, что поверхностное натяжение обменной спирали в данной точке является функцией локального значения $\xi(x)$. Для нахождения этой функции рассмотрим обменную спираль в континуальном приближении, как это было сделано для случая обменной спирали на компенсированной границе раздела слоев [8]. Бóльшая часть обменной спирали находится в антиферромагнетике, а меньшая — в ферромагнетике. В отсутствие внешнего магнитного поля углы разворота параметров порядка в плоскости слоев, отсчитанные от легкой оси, описываются следующими функциями [8]:

$$\cos\theta_f = \mathrm{th}\left[-\sqrt{2\alpha_{\rm f}}(z - z_0)\right], \qquad (6)$$

$$\cos\theta_{af} = \mathrm{th}\left[-\sqrt{2\alpha_{\rm af}}(z - \xi)\right], \qquad (7)$$

где для случая объемно центрированной решетки с восьмью ближайшими соседями

$$\alpha_{\rm f(af)} = \frac{K_{\|\rm f(af)}}{4|J_{\rm f(af)}|} \ll 1. \qquad (8)$$

Из условия на границе $\theta_f(0) = \theta_{af}(0)$, справедливого, когда константа анизотропии намного меньше $|J_{f,af}|$, имеем

$$z_0 = \xi\sqrt{\frac{\alpha_{af}}{\alpha_f}}. \tag{9}$$

Интегрируя по $z$, находим поверхностное натяжение доменной стенки

$$\tilde{\varepsilon}(\xi) = \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_{af} + \varepsilon_f) + \text{th}\left(\frac{\xi}{\Delta_{af}}\right)(\varepsilon_{af} - \varepsilon_f)\right], \tag{10}$$

где $\varepsilon_{af}$ и $\varepsilon_f$ — поверхностные натяжения блоховских доменных стенок в антиферромагнетике и ферромагнетике соответственно.

Энергия $W$ обменной спирали в расчете на единицу длины вдоль оси $y$ равна

$$W = \int_0^R dx\,\tilde{\varepsilon}(\xi)\sqrt{1 + \left(\xi'(x)\right)^2}. \tag{11}$$

Здесь мы пренебрегли изменением поверхностного натяжения участков обменной спирали, находящихся на расстоянии порядка $\Delta_{af}$ от краев атомных ступеней. Граничные условия имеют вид

$$\xi(0) = \xi(R) = 0. \tag{12}$$

Варьируя функционал (11) по $\xi$, получаем уравнение Эйлера

$$\frac{\partial\tilde{\varepsilon}(\xi)}{\partial\xi} - \frac{\tilde{\varepsilon}(\xi)\xi''}{1 + (\xi')^2} = 0. \tag{13}$$

Пренебрегая слагаемым $(\xi')^2 \ll 1$ и полагая, что $\tilde{\varepsilon}(\xi) \approx \varepsilon_{af}$, приходим к уравнению

$$\xi'' + \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_{af}}{2\varepsilon_{af}\Delta_{af}}\,\text{ch}^{-2}\left(\sqrt{2\alpha_{af}}\,\xi\right) = 0. \tag{14}$$

Проводя замену переменных

$$\eta = \sqrt{2\alpha_{af}}\,\xi \equiv \xi/\Delta_{af}, \tag{15}$$

$$q = \frac{x}{\Delta_{af}}\sqrt{\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_{af}}{\varepsilon_{af}}}, \tag{16}$$

приходим к уравнению

$$2\eta''_{qq} = -\frac{1}{\text{ch}^2\,\eta}, \tag{17}$$

первая квадратура которого имеет вид

$$\left(\eta'_q\right)^2 = -\,\text{th}\,\eta + A. \tag{18}$$

В точке $x = R/2$ $\eta'_q = 0$, а величина $\xi$ достигает максимального значения $d$. Тогда $A = \text{th}(d/\Delta_{af}) \equiv \text{th}\,\eta_{max}$ и

$$\eta'_q = \pm\sqrt{\text{th}\,\eta_{max} - \text{th}\,\eta}. \tag{19}$$

На участке $0 < x < R/2$ величина $\eta' > 0$. Поскольку $\eta(0) = 0$ (12),

$$q = \int_0^\eta \frac{dp}{\sqrt{\text{th}\,\eta_{max} - \text{th}\,p}}, \tag{20}$$

а прогиб обменной спирали находится из уравнения

$$\int_0^{\eta_{max}} \frac{dp}{\sqrt{\text{th}\,\eta_{max} - \text{th}\,p}} = q_{max}, \tag{21}$$

где

$$q_{max} \equiv \frac{R}{2\Delta_{af}}\sqrt{\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_{af}}{\varepsilon_{af}}}. \tag{22}$$

Рассчитанные в рамках данной модели зависимость прогиба обменной спирали от константы анизотропии и форма обменной спирали приведены на рис. 5 и 6 соответственно. С точностью 10% они совпадают с результатами численного моделирования.

## 5. Заключение

Сформулируем выводы работы.

1. Изогнутость обменных спиновых спиралей приводит к повышению их поверхностной энергии и сдвигу точки фазового перехода первого рода из полидоменной в монодоменную фазу в сторону бóльших значений $L/R$.

2. Предложенная аналитическая модель с хорошей точностью описывает форму обменных спиновых спиралей в широком диапазоне значений константы анизотропии.

## Список литературы


[1] А.И. Морозов, И.А. Морозов. ФТТ **50**, 1846 (2008).
[2] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **46**, 385 (2004).
[3] А.И. Морозов, А.С. Сигов. ФТТ **54**, 209 (2012).
[4] А.И. Морозов. ФТТ **50**, 675 (2008).
[5] E.E. Fullerton, J.S. Jiang, M. Grimsditch, C.H. Sowers, S.D. Bader. Phys. Rev. B **58**, 12 193 (1998).
[6] J.S. Jiang, E.E. Fullerton, C.H. Sowers, A. Inomata, S. Bader, A.J. Shapiro, R.D. Shull, V.S. Gornakov, V.I. Nikitenko. IEEE Trans. Magn. **35**, 3229 (1999).
[7] V.K. Vlasko-Vlasov, U. Welp, J.S. Jiang, D.J. Miller, G.W. Grabtree, S.D. Bader. Phys. Rev. Lett. **86**, 4386 (2001).
[8] А.И. Морозов, Д.О. Рынков. ФТТ **49**, 1849 (2007).