Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 2, с. 125 – 130

Исследование кинетики доменных структур в тонких ферромагнитных пленках методом Ванга–Ландау

П. А. Прудковский[1)]

Физический факультет, МГУ им. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 июня 2013 г.

Рассмотрены особенности фазового перехода между строгой полидоменной структурой в тонких ферромагнитных пленках с поперечной анизотропией и так называемой тетрагональной фазой, в которой домены могут извиваться и разрываться на части. Показано, что с термодинамической точки зрения фазовый переход следует считать переходом типа Костерлица–Таулесса, роль вихрей в котором играют тупики доменов. С помощью численного алгоритма Ванга–Ландау продемонстрировано, что кинетика данного фазового перехода существенно замедлена из-за наличия у системы большого числа метастабильных состояний, что отчасти роднит ее с системами типа спиновых стекол.

DOI: 10.7868/S0370274X13140130

Одним из интересных объектов современных исследований в области теории конденсированного состояния, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение, являются тонкие многослойные ферромагнитные пленки. Важной особенностью таких пленок является возникновение в них при достаточно малой толщине поперечной анизотропии: намагниченность в такой системе стремится оказаться направленной перпендикулярно плоскости пленки [1, 2]. При достаточно низких температурах это приводит к возникновению в них доменной структуры.

Причина возникновения доменов в ферромагнетиках и сегнетоэлектриках – баланс между энергией доменных границ и энергией деполяризующего поля – была указана еще в 1935-м году [3] в работе Ландау и Лифшица. Следующим важным шагом в описании фазовых переходов с формированием доменных структур стала работа Бразовского [4] 1975-го года. В ней он обобщил ренормгрупповой подход Вильсона [5] на системы с эффективным гамильтонианом, имеющим минимум при ненулевом значении волнового вектора $\mathbf{k}_0$ (которое как раз и определяет период возникающей доменной структуры $d = 2\pi/k_0$). Ненулевое значение k_0 может возникнуть по ряду причин. Одной из них является наличие дальнодействующих сил деполяризующего поля. Работа Бразовского, в частности, ставит под сомнение возможность существования дальнего порядка в двумерных системах с модуляцией: его разрушают флуктуации направления $\mathbf{k}_0$. Однако, как было показано позже [6, 7], любое внесение анизотропии делает появление дальнего порядка в двумерной системе возможным. Для возникновения такой анизотропии достаточно наличия кристаллической решетки.

Для описания тонких ферромагнитных пленок с поперечной анизотропией обычно используется двумерная модель Гейзенберга, дополненная членами, ответственными за анизотропию и дальнодействующее дипольное взаимодействие [8–12]. При слабой анизотропии основное состояние такой системы – монодоменное состояние с магнитными моментами, лежащими в плоскости пленки. При превышении величиной анизотропии некоторого критического значения полидоменное состояние становится выгоднее монодоменного [13]. При сильной анизотропии магнитные моменты направлены практически перпендикулярно плоскости пленки и для описания системы оказывается достаточно модели Изинга с дипольным взаимодействием [14–21]:

$$H_{\mathrm{eff}} = -J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j + A\sum_{ij} \frac{S_i S_j}{|R_i - R_j|^3}. \qquad (1)$$

Здесь $S_i = \pm 1$, первый член описывает изинговское взаимодействие между ближайшими соседями, а второй – дипольное взаимодействие между всеми спинами в решетке. Исследование фазовой диаграммы даже такой упрощенной модели оказывается достаточно нетривиальным. Ее основное состояние зависит от соотношения коэффициентов A и J. В случае сильного дипольного взаимодействия, $0.85A > J$, система переходит в антиферромагнитное состояние [14]. При меньших значениях A ее основным состоянием является система доменов в форме длинных полос, ширина которых растет по мере уменьшения отно-

[1)]e-mail: vysogota@gmail.com

шения A/J. Отметим, что при его приближении к нулю этот рост становится быстрее экспоненциального [15]. Поэтому в случае слабого дипольного взаимодействия образец конечных размеров перейдет в монодоменное состояние.

Нагревание системы приводит к разрушению доменной структуры. Однако прежде, чем перейти в полностью неупорядоченное состояние, система оказывается в частично упорядоченном состоянии, в котором домены еще сохраняются, но начинают извиваться и образовывать лабиринтоподобные структуры [16–21]. Обычно его называют тетрагональной жидкокристаллической фазой [9]. Это состояние, в котором уже отсутствует дальний порядок, но еще частично сохраняется периодичность, характерная для доменной структуры, вызывает наибольший интерес.

Переход между тетрагональной фазой и полностью неупорядоченным состоянием не представляет особого интереса. Судя по всему, он всегда происходит по сценарию изинговского фазового перехода. А вот переход между упорядоченным полидоменным состоянием системы и тетрагональной фазой многократно исследовался как численно [16–20], так и аналитически [15, 20, 21]. В работе [15] из общих масштабных соображений было показано, что температура фазового перехода должна расти с уменьшением отношения A/J. Таким образом, при слабом дипольном взаимодействии тетрагональная фаза будет отсутствовать, а система сразу перейдет в полностью неупорядоченное состояние. Те же авторы полагают [16], что разрушение жесткой доменной структуры связано с возникновением разрывов доменов, играющих роль дисклинаций и приводящих к фазовому переходу типа Костерлица–Таулесса [22, 23].

С другой стороны, в работах [17–19] на основе результатов моделирования методом Монте-Карло были сделаны выводы о том, что в зависимости от величины отношения A/J переход между жесткой полидоменной и тетрагональной фазами является или одним фазовым переходом 1-го рода, или двумя последовательными фазовыми переходами с еще одной частично упорядоченной "нематической" фазой между ними. В работе [20] в рамках приближения среднего поля было показано, что в отсутствие флуктуаций место этой нематической фазы на фазовой диаграмме занимают различные состояния с несоразмерной фазой [24]. Попытка описания нематической фазы в рамках приближения среднего поля была реализована в работе [21]. В ней использовался дополнительный параметр порядка. При этом с помощью результатов [7] было показано, что переход между нематической и тетрагональной фазами должен происходить по сценарию перехода Костерлица–Таулесса. Отметим, что в контексте последней работы не совсем понятно, следует ли как-то разделять нематическую фазу и состояние с упорядоченной доменной структурой или они плавно переходят одно в другое.

В данной работе будут рассмотрены особенности кинетики доменной структуры в двумерной модели Изинга с дипольным дальнодействием (1) вблизи фазового перехода между упорядоченным полидоменным состоянием системы и тетрагональной фазой. При помощи численного алгоритма Ванга–Ландау [25, 26] будет показано, что хотя с термодинамической точки зрения этот переход, по всей видимости, следует считать переходом типа Костерлица–Таулесса, с кинетической точки зрения система имеет особенности, характерные для спиновых стекол [27]: большое число метастабильных состояний, существенно замедляющих релаксацию системы к основному состоянию.

Основное состояние системы содержит домены в форме длинных полос, ширина d которых определяется минимумом энергии (1). При нагревании домены начинают слегка извиваться. При приближении к температуре перехода в тетрагональную фазу появляются разрывы доменов, приводящие к возникновению тупиков. Однако даже в этом случае систему можно рассматривать как совокупность доменов, пусть и непостоянной ширины и конечной длины. Это позволяет уменьшить количество переменных в модели (1). Вместо описания состояния спинов в двумерной решетке будет записывать энергию системы как функцию координат одномерных объектов – доменных стенок:

$$H_{\text{eff}} = \sum_i \left\{ aL_i + b \int f(\rho_i) dl_i \right\} + 2hk. \qquad (2)$$

Суммирование здесь идет по всем доменным стенкам. Первый член суммы (2) соответствует энергии доменных границ, пропорциональной их длине, второй описывает энергию доменов, зависящую от расстояния ρ_i между соседними стенками. Именно здесь мы делаем основное приближение. В качестве функции $f(\rho)$ использована функция, рассчитанная для неизвивающихся доменов:

$$f(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\rho} \int_0^{\rho} \frac{dx_1 dx_2}{[(x_2 - x_1)^2 + y^2]}. \qquad (3)$$

Использование этой функции наиболее некорректно в области тупиков доменов. Поэтому третий член суммы (2) учитывает дополнительную энергию h,

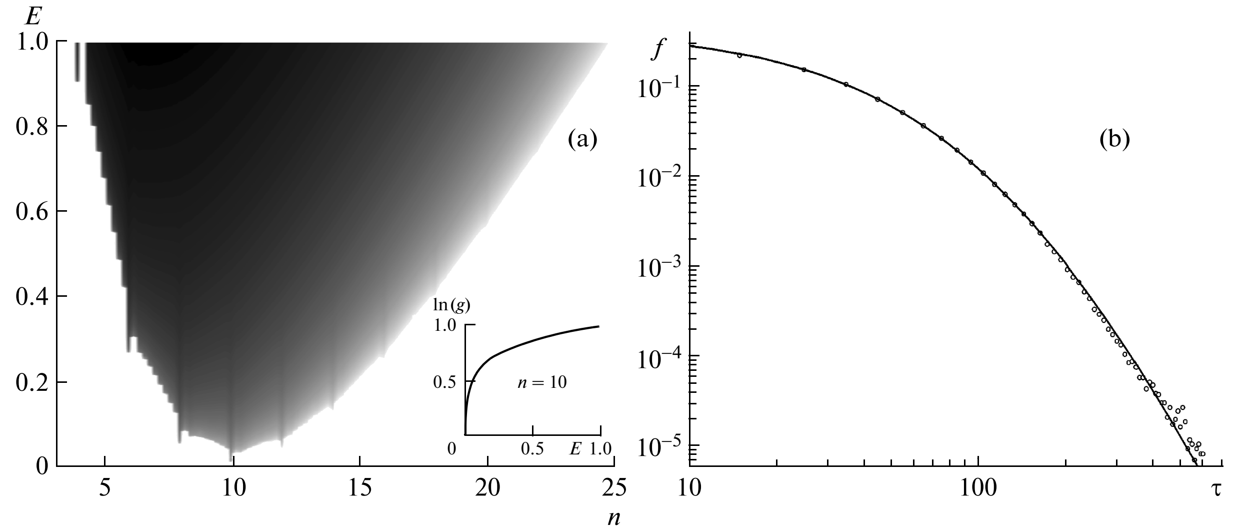

Рис. 1. (a) – Логарифм плотности состояний $\ln g$ системы доменных границ (2) как функция энергии системы E и среднего числа доменов n, полученный методом Ванга–Ландау. На вставке отдельно показано поведение логарифма плотности состояний при заданном числе доменов $n = 10$. (b) – Функция распределения числа шагов в алгоритме Ванга–Ландау, за которое система (2) переключается между упорядоченными полидоменными состояниями с числом доменов $n = 8$ и 10. Точками показаны результаты численного моделирования, линией – их аппроксимация распределением Фреше (4) с показателем $\varepsilon = 6.1 \pm 0.1$

связанную с каждым тупиком, которых в два раза больше, чем замкнутых траекторий доменных стенок k.

Вероятность системы (2) оказаться в различных конфигурациях мы исследовали при помощи численного алгоритма Ванга–Ландау [25, 26]. Последний предназначен для изучения систем с несколькими метастабильными состояниями, переключения между которыми могут происходить слишком долго для моделирования их при помощи классического метода Монте-Карло, например для фазовых переходов 1-го рода. Тройер с соавторами [27] использовал алгоритм Ванга–Ландау для изучения плотности состояний спиновых стекол, имеющих очень большое число метастабильных состояний, разделенных потенциальными барьерами различной высоты. Однако для описания статистики стекол даже алгоритма Ванга–Ландау оказывается недостаточно. В работе [27] было показано, что функция распределения числа шагов, требующихся для переключения из одного метастабильного состояния системы в другое, имеет алгебраически медленно спадающий хвост, что приводит к расходимости высших моментов распределения. Именно эта расходимость моментов вплоть до дисперсии и среднего является, по мнению Тройера, косвенным признаком стекольности системы.

На рис. 1a приведен логарифм плотности состояний $g(E, n)$ системы (2), полученный при помощи алгоритма Ванга–Ландау, в зависимости от энергии системы и среднего числа доменных стенок n. Целые четные значения n соответствуют строгой полидоменной структуре с тем же числом доменов. Минимумы энергии системы, соответствующие таким состояниям, хорошо видны на графике. При промежуточных значениях n в системе имеются петли, образованные доменными стенками, т.е. тупики доменов. Сложность получения плотности состояний такой системы связана с тем, что плотность состояний отдельной извивающейся нити имеет логарифмическую расходимость в области минимума энергии. Состояния с полностью выпрямленными доменными стенками так и не были нами достигнуты. Тем не менее полученная плотность состояний описывает вероятности попадания системы во всевозможные промежуточные состояния при перестройке между упорядоченными состояниями с различным числом доменов. На рис. 1b приведена функция распределения числа шагов, требующихся системе для перехода между двумя такими состояниями (например, с $n = 8$ и 10). Следуя Тройеру [27], мы аппроксимировали полученную зависимость распределением Фреше:

$$f(\tau) = \alpha y^{-1-\alpha} \exp(-y^{-\alpha}); \quad y = (\tau - \mu)/\beta. \qquad (4)$$

Распределения такого типа используются в теории экстремальных величин для описания длинных хвостов распределения. В нашем случае было получено значение $\varepsilon = 6.1 \pm 0.1$. Это означает расходимость всех высших моментов, начиная с седьмого, так как хвост распределения спадает по закону $f(\tau) \sim \tau^{-1-\alpha}$.

С одной стороны, отсюда следует, что переключение между упорядоченными состояниями с различным числом доменов иногда происходит крайне долго. Система склонна застревать в промежуточных метастабильных состояниях. Напомним, что τ – это не реальное время, а число шагов. В реальной кинетике функция распределения временных интервалов спадала бы еще медленнее, так как алгоритм Ванга–Ландау специально “выталкивает” систему из самых вероятных состояний. С другой стороны, хвост распределения оказывается все же не настолько медленно спадающим, как в работе Тройера для спиновых стекол. Попробуем выяснить причину такого поведения системы.

Для перехода между двумя полидоменными состояниями с разным числом доменов неизбежно должен возникнуть как минимум один домен конечной длины, ограниченный тупиками (который затем или вырастет до бесконечной длины, или, наоборот, схлопнется). Как и в работах [15, 16], будем считать тупики доменов (рис. 2a) аналогами вихрей в модели Костерлица–Таулесса. Действительно, несложно показать, что энергия, связанная с возникновением отдельного тупика, логарифмически зависит от размеров системы R. Приближенно заменяя доменные стенки ломаными линиями (рис. 2b) и считая, что размер области доменной структуры, искаженной из-за тупика, растет по мере удаления от него, получаем, что избыточная длина доменной стенки на расстоянии m доменов от тупика имеет вид

$$\Delta L_m = \sqrt{d^2 + (2md)^2} - 2md \xrightarrow{m \gg 1} d/2m. \qquad (5)$$

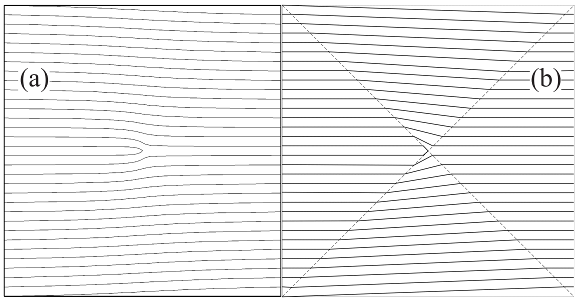

Рис. 2. Тупик домена и вызванное им искажение доменной структуры. (a) – Найденная численно структура, обеспечивающая минимум энергии системы. (b) – Приближенное изображение доменных границ ломаными линиями

В результате энергия тупика, связанная с суммарной избыточной длиной доменных стенок, оказывается логарифмически зависящей от размера системы: $\Delta E = a \sum_m \Delta L_m \approx ad \ln(R/d)$. Этот вывод подтверждается численным расчетом энергии доменного тупика в системах с различным числом доменов (рис. 3).

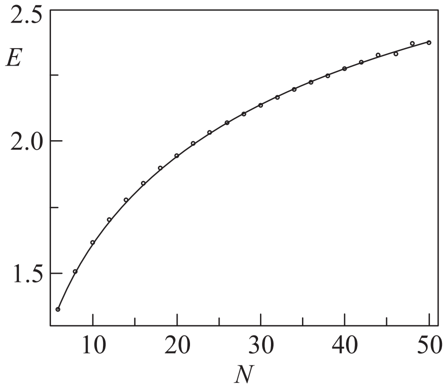

Рис. 3. Зависимость избыточной энергии доменной структуры, связанной с ее искажением, вызванным тупиком домена, от числа доменов. Точками показаны результаты численного расчета энергии системы (см. рис. 2a), линией – результат аппроксимации логарифмической зависимостью $E = a \ln(N/b)$, где $a = 0.50 \pm$ $\pm\, 0.03$, $b = 0.34 \pm 0.01$

Таким образом, разрыв домена с возникновением двух тупиков, обращенных в противоположные стороны, либо появление зародыша нового домена означают возникновение пары вихрей с противоположными зарядами. Перемещение этих тупиков-вихрей отвечает изменению длины домена. Увеличение расстояния между тупиками приводит к увеличению размеров области искажения доменной структуры, вызванной этими тупиками, что означает притяжение между ними. Слияние двух приблизившихся друг к другу тупиков или исчезновение домена, сократившегося до минимальной длины, означает аннигиляцию пары вихрей.

Другими словами, систему тупиков доменной структуры можно описывать как систему вихрей в классической модели Костерлица–Таулесса [22, 23]:

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln(|R_i - R_j|/r) + 2hk. \qquad (6)$$

Здесь суммирование идет по всем тупикам, r – минимальное расстояние между тупиками (по порядку величины равное ширине доменов d), заряд $q_i = \pm 1$ описывает направление тупика, k – число доменов конечной длины (т.е. число пар тупиков), а $2h$, как и раньше, – энергия возникновения пары тупиков.

Таким образом, с термодинамической точки зрения в рамках нашего приближения фазовый переход между регулярной полидоменной структурой и тетрагональной фазой должен быть переходом типа Костерлица–Таулесса. В то же время с кинетической точки зрения между обычными вихрями и тупиками в нашей модели есть важное различие: вихри в обычной модели Костерлица–Таулесса могут свободно перемещаться в любом направлении, тогда как перемещение тупиков доменов ограничено соседними доменами. Если два тупика противоположного направления разделены доменом, то для их аннигиляции этот домен сперва должен разорваться, образовав еще одну пару тупиков. Только после этого все четыре тупика смогут аннигилировать. В результате для релаксации в полидоменное состояние без тупиков система должна пройти потенциальный барьер, высота которого равна энергии возникновения лишней пары тупиков.

Таким образом, в системе тупиков-вихрей существуют различные метастабильные состояния, отделенные от основного состояния одним или несколькими потенциальными барьерами. Это существенно замедляет процесс релаксации системы к основному состоянию и приводит к возникновению степенного хвоста спадания функции распределения на рис. 1b. С другой стороны, в отличие от спиновых стекол, все эти потенциальные барьеры имеют приблизительно одинаковую высоту.

Для подтверждения нашего вывода мы провели сравнительное моделирование системы вихрей (6), свободно перемещающихся в плоскости, и точно такой же системы, в которой вихри могут перемещаться только в одном направлении. На рис. 4a приведена зависимость среднего числа вихрей в обеих системах от температуры, полученная на основе плотности состояний этих систем, вычисленной методом Ванга–Ландау. Так как с термодинамической точки зрения эти системы одинаковы, нет ничего удивительного в том, что для обеих систем получилась одна и та же зависимость. Для температур, меньших температуры фазового перехода, эта зависимость имеет вид $k \sim e^{-\alpha/T}$, что соответствует результатам работы [28].

В то же время функции распределения времен, которые системы проводят в различных состояниях, заметно различаются. На рис. 4b показаны функции распределения числа шагов, которые обе системы

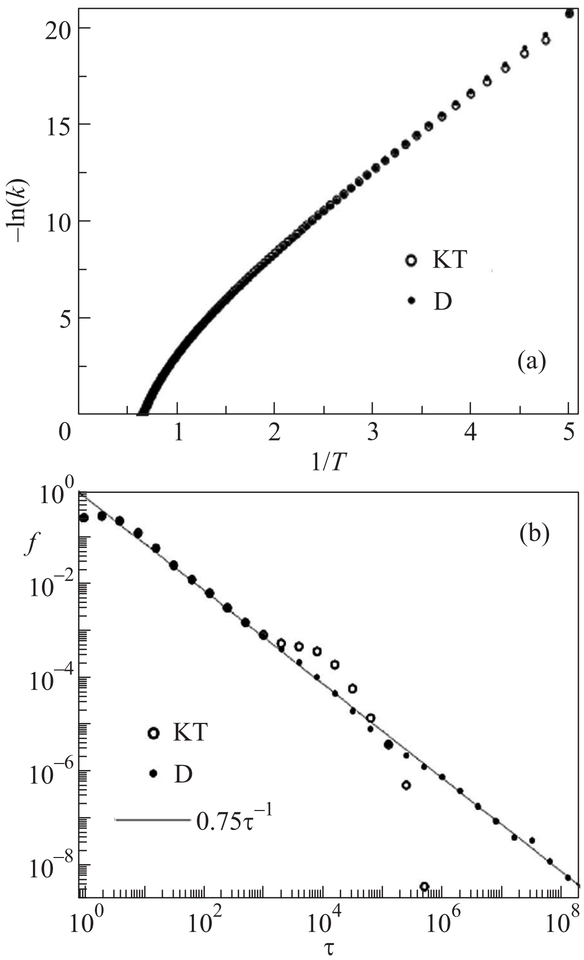

Рис. 4. Зависимость логарифма среднего числа вихрей от обратной температуры (a) и функция распределения числа шагов алгоритма Ванга–Ландау, которое система проводит в состоянии с двумя парами вихрей (b), для системы свободно перемещающихся вихрей (KT) и системы тупиков-вихрей, перемещающихся только в одном направлении (D). Линией показана аппроксимация хвоста распределения степенной функцией

проводят в состояниях с двумя парами вихрей. Для системы свободных вихрей в модели Костерлица-Таулесса это распределение резко обрывается. Функция распределения для модели, в которой вихри перемещаются лишь в одном направлении, имеет длинный хвост, спадающий по степенному закону $f(\tau) \sim \sim 1/\tau$. Это означает, что среднее время, которое система проводит в данном состоянии, может стремиться к бесконечности. Сходным образом ведут себя и функции распределения числа шагов для состояний с другим числом пар вихрей.

Итак, в работе рассмотрено поведение доменной структуры в модели Изинга с дипольным отталкиванием вблизи фазового перехода между регулярной полидоменной структурой и тетрагональной фазой. Для упрощения анализа двумерная система спинов заменена системой одномерных объектов – доменных границ. Их поведение, в свою очередь, сведено к системе точечных дефектов – тупиков доменов, играющих роль вихрей в модели Костерлица–Таулесса. Невозможность перемещения тупиков-вихрей поперек доменной структуры приводит к возникновению у системы большого числа метастабильных состояний, разделенных потенциальными барьерами с высотой, равной энергии возникновения пары доменных тупиков.

Залипание системы в этих метастабильных состояниях существенно замедляет ее релаксацию. Действительно, для аннигиляции двух тупиков, разделенных доменом, должен разорваться именно этот домен. Если же в результате флуктуации разорвется какой-то другой домен, то это может перевести систему в другое метастабильное состояние и только увеличить время ее возвращения в состояние с регулярной доменной структурой. В результате множество таких метастабильных состояний с барьерами между ними образует сложный "потенциальный лабиринт", блуждание по которому, судя по полученным результатам, может длиться крайне долго. Эта особенность системы делает ее схожей со спиновыми стеклами. Однако доменную структуру в тонких ферромагнитных пленках все-таки не следует считать полноценным стеклом. Метастабильные состояния в спиновых стеклах разделены потенциальными барьерами всевозможных высот, что приводит к отсутствию в них точки фазового перехода. В нашем же случае все потенциальные барьеры имеют одну и ту же высоту. Поэтому должна существовать фиксированная температура фазового перехода между регулярной доменной структурой и тетрагональной фазой.

В заключение отметим, что в случае моделирования этой же системы при помощи обычного метода Монте-Карло ее залипание в различных метастабильных состояниях может быть значительно более долгим, чем при моделировании методом Ванга–Ландау. В совокупности со сложностью определения точки фазового перехода типа Костерлица–Таулесса [28] это может производить ошибочное впечатление наличия дополнительной промежуточной "нематической" фазы.

Автор благодарен М.И. Кацнельсону и А.Н. Рубцову за плодотворные дискуссии. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ # 11-02-01074-а.

1. H. J. G .Draaisma and W. J. M de Jonge, J. Appl. Phys. **62**, 3318 (1987).
2. F. J. A. den Broeder, D. Kuiper, A. P. van de Mosselaer, and W. Hoving, Phys. Rev. Lett. **60**, 2769 (1988)
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Phys. Zs. Sowjet. **8**, 153 (1935).
4. С. А. Бразовский, ЖЭТФ **68**, 175 (1975).
5. К. Дж. Вильсон, УФН **141**, 193 (1983).
6. D. G. Barci and D. A. Stariolo, Phys. Rev. Lett. **98**, 200604 (2007).
7. D. G. Barci and D. A. Stariolo, Phys. Rev. B **79**, 075437 (2009).
8. A. B. Kashuba and V. L. Pokrovsky, Phys. Rev. B **48**, 10335 (1993).
9. Ar. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, and W. M. Saslow, Phys. Rev. B **51**, 1023 (1995).
10. E. A. Jagla, Phys. Rev. B **72**, 094406 (2005).
11. M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighín et al., Phys. Rev. B **77**, 134417 (2008).
12. S. A. Pighin, O. V. Billoni, D. A. Stariolo, and S. A. Cannas, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **322**, 3889 (2010).
13. Y. Yafet and E. M. Gyorgy, Phys. Rev. B **38**, 9145 (1988).
14. A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, and K. De'Bell, Phys. Rev. B **51**, 16033 (1995).
15. A. D. Stoycheva and S. J. Singer, Phys. Rev. Lett. **84**, 4657 (2000); Phys. Rev. E **64**, 016118 (2001).
16. A. D. Stoycheva and S. J. Singer, Phys. Rev. E **65**, 036706 (2002).
17. M. Casartelli, L. Dall'Asta, E. Rastelli, and S. Regina, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 11731 (2004).
18. S. A. Cannas, M. F. Michelon, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit, Phys. Rev. B **73**, 184425 (2006).
19. E. Rastelli, S. Regina, and A. Tassi, Phys. Rev. B **73**, 144418 (2006).
20. S. A. Pighin and S. A. Cannas, Phys. Rev. B **75**, 224433 (2007).
21. D. G. Barci and D. A. Stariolo, Phys. Rev. B **84**, 094439 (2011).
22. J. M. Kosterlits and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
23. J. M. Kosterlitz, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1046 (1974).
24. T. Janssen and J. A. Tjon, J. Phys. C: Solid St. Phys. **16**, 4789 (1983).
25. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
26. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
27. P. Dayal, S. Trebst, S. Wessel et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 097201 (2004).
28. R. Gupta and C. F. Baillie, Phys. Rev. B **45**, 2883 (1992).