

混合磁性薄膜矫顽力及阶梯效应的微磁学 及 Monte Carlo 研究*

翁臻臻¹⁾ 冯 倩¹⁾ 黄志高^{1,2)} 都有为²⁾

¹⁾ 福建师范大学物理与光电信息科技学院, 福州 350007) ²⁾ 南京大学固体微结构国家重点实验室, 南京 210093)

(2003 年 10 月 13 日收到, 2004 年 1 月 2 日收到修改稿)

采用能量极小原理的微磁学及 Monte Carlo 方法对铁磁/反铁磁混合磁性薄膜的磁特性进行了模拟计算, 研究了基态下系统的磁滞回线、自旋组态及铁磁交换作用常数 J_{AA} 、单轴各向异性常数 K 、偶极相互作用常数 D 和铁磁性原子掺杂量 X 对矫顽力 H_c 的影响. 同时还模拟计算了矫顽力 H_c 的温度特性. 模拟结果表明, 在混合磁性薄膜中磁滞回线存在明显的阶梯效应. 利用简单的 Ising 模型揭示这种阶梯效应主要起源于包含不同反铁磁原子的掺杂量的不同尺寸的原子团对外加磁场所产生不同响应. 在基态下当 $0.5 \leq X \leq 1.0$ 时矫顽力 H_c 随 K, J_{AA} 的增大而增大, 但随 D 增大而减小; H_c 随 X 的变化存在极大值. 这些结果很好地解释了具有反铁磁耦合的颗粒膜的实验事实. 不同 X 下矫顽力随温度的变化规律可以用 T^α 律很好地描述, 但 α 值随 X 却有复杂的变化.

关键词: 蒙特卡罗, 微磁学, 阶梯效应, 混合磁系统, 矫顽力

PACC: 7540M, 7560E, 7530H

1. 引 言

近年来磁性多层膜、颗粒膜由于其磁电阻效应和交换偏置引起人们广泛的关注^[1-5]. 矫顽力作为磁性材料的重要参量之一, 它对磁性材料的应用有重要的影响. 近年来, 混合磁性系统的矫顽力研究也成为人们感兴趣的课题^[6]. 20 世纪 80 年代以来, 人们对反铁磁掺杂磁混合系统就已经开展了研究^[7-13]. 特别近年来在铁磁(FM)/反铁磁(AF)薄膜中发现的交换偏置效应更激发了人们对混合磁性系统的兴趣^[14-17]. 在该系统中, 交换偏置的大小和符号往往与 FM/AF 磁层及复杂的磁性界面层有很大的关系. 1997 年, Viitala 等人采用 Ising 模型研究了反铁磁小原子团的磁特性, 发现阶梯状磁化曲线, 但对产生阶梯的起因没有作出很好的解释^[18]. 尽管 Vogel 等人利用 Monte Carlo 方法研究了铁磁、反铁磁混合 Ising 方形、三角晶格的磁化行为, 并简单地说明了产生阶梯状的磁滞回线的原因, 但对磁性混合系统的磁化行为缺乏系统的研究^[19, 20]. 本文将基于 Heisenberg 模型采用微磁学和 Monte Carlo 方法对混合磁性系统的磁化行为进行系统的研究, 重点研究

了基态情况下系统的磁滞回线的阶梯效应, 及铁磁交换作用常数 J_{AA} 、各向异性常数 K 、偶极相互作用常数 D 、铁磁性原子掺杂量 X 对矫顽力的影响. 同时, 我们得到了不同 X 下矫顽力随温度的变化曲线, 其变化规律可以用 T^α 律很好的描述, 但 α 值随 X 却有复杂的变化.

2. 模拟和方法

考虑 10×10 的二维简单结构, 在各个格点上分布不同自旋取向的原子或原子团, 采用周期边界条件. 在 Heisenberg 模型下系统的哈密顿量可表示为

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j + D \sum_{ij} \left[\frac{S_i \cdot S_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(S_i \cdot r_{ij})(S_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - K \sum_i (S_i \cdot u_i)^2 - H \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

式中等号右边第 1 项为交换作用能项, 第 2 项为偶极相互作用能项, D 为偶极相互作用常数, 第 3 项为各向异性能项, K 为各向异性常数, 第 4 项为塞曼能项, H 为外磁场, 其方向沿 z 轴方向; S_i, S_j 分别代

* 教育部高等学校骨干教师资助计划, 福建省自然科学基金重点项目(批准号: F0320002)及国家 973 项目(批准号: 1999064508)资助的课题.

表第 i, j 格点上原子或原子团的自旋, r_{ij} 是自旋 S_i 和 S_j 的相对距离, u_i 是 i 格点处易轴的单位矢量; 交换作用常数 J_{ij} 随 i 和 j 格点处原子或原子团类型而定, 具体定义如下: 设磁性系统由 A, B 两类原子或原子团组成, 两类原子或原子团有相同的自旋大小且 $|S_A| = |S_B| = 1$. 在这种双原子或原子团系统中, 共有 3 种交换耦合模式, 即 $J_{AA}, J_{AB} (J_{BA}), J_{BB}$. 假设 A 为铁磁性原子或原子团, B 为反铁磁性原子或原子团. 在一般的合金中, 通常 Fe, Co, Ni 都是铁磁性原子而 Cr, Mn 是反铁磁性原子. 而在颗粒膜和块状颗粒合金中, 如 Fe-Cr 块状颗粒合金和颗粒膜^[4, 21]及铁磁与反铁磁相分离的 Fe-Cr-Mn 合金^[22], 从实验上发现存在具有铁磁性耦合的富铁原子团及具有反铁磁耦合的富铬原子团. 为了解释由 Fe 与 SiO_2 靶前后溅射获得的 $\text{Fe}_{30}(\text{SiO}_2)_{70}$ 颗粒膜自旋重取向行为, 认为在样品中存在 Fe-Si 铁磁相和 Fe_2SiO_4 反铁磁相^[5]. 对于具有铁磁和反铁磁混合的系统, 可以假设 $J_{AA} > 0, J_{BB} < 0, J_{AB} < 0$. 本工作中, 假设 $J_{BB} = J_{AB} = -1, J_{AA} = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 3.0, -J_{BB}$ 取为能量和温度的约化单位. 设 A 类铁磁性原子或原子团占据比例为 X, B 类反铁磁性原子或原子团占据比例为 $1 - X$. (1) 式给出了系统磁相互作用的一般表示式, 但在分别应用于一般合金和颗粒系统, 各项的权重有相当大的区别. 对一般的合金系统, 磁各向异性能和偶极相互作用能相对交换能要小得多. 但对颗粒膜系统, 磁各向异性能和偶极相互作用能可与交换能相竞争, 起重要的作用. 本工作的研究更侧重于颗粒膜情况.

在 Hughes 和 Kodama 提出的微磁学方法的基础上^[23, 24], 我们发展了一种改进的微磁学方法的计算程序并成功地应用于磁性薄膜的磁化行为的计算^[25]. 其算法的主要原理描述如下: 设在二维体系中, 某原子坐标为 (i', j') , 其近邻原子坐标为 $(h',$

$k')$. 每个格点的磁性原子的自旋取向用 θ_{ij} 来表征, 那么所有的 θ_{ij} 确定了系统的自旋组态. 定义 δE 为所有单个原子自旋方向同时微扰 $\delta\theta_{ij}$ 引起的能量变化. 对 δE 进行二阶泰勒展开可得到

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_{ij} (\partial E / \partial \theta_{ij}) \delta \theta_{ij} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ijhk} (-\partial^2 E / \partial \theta_{ij} \partial \theta_{hk}) \delta \theta_{ij} \delta \theta_{hk} \\ &\cong \sum_{ij} T_{ij} \delta \theta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijhk} (\partial T_{ij} / \partial \theta_{hk}) \delta \theta_{ij} \delta \theta_{hk} \\ &\cong (T) \cdot (\delta \theta) + \frac{1}{2} (\delta \theta) \cdot (Q) \cdot (\delta \theta), \quad (2) \end{aligned}$$

若 $(\theta_{ij} + \delta\theta_{ij})$ 对应的 δE_{m+1} 不超过 θ_{ij} 对应的 δE_m 的 20%, 且 $\delta E_{m+1}, \delta E_m$ 都小于零, 则认为找到系统的能量极小方向. (2) 式中的 T, Q 和 $d\theta$ 矩阵表示式分析如下.

设第 i 个格点初始的自旋取向为 S_{0i} , 通过旋转后的自旋取向表示为^[19]

$$S_i(\alpha_i, \beta_i) = \frac{S_{0i} + \alpha_i e_{\alpha i} + \beta_i e_{\beta i}}{\sqrt{1 + \alpha_i^2 + \beta_i^2}}, \quad (3)$$

式中 $e_{\alpha i}, e_{\beta i}$ 互为垂直且与 S_{0i} 正交. 因为对小的旋转角度, $\text{tg} \alpha \approx \alpha, \text{tg} \beta \approx \beta$, 所以用 α_i, β_i 的弧度值分别表示翻转后的自旋在 $e_{\alpha i}, e_{\beta i}$ 的投影值.

在 $(S_{0i}, e_{\alpha i}, e_{\beta i})$ 直角坐标体系中, 能量的一阶导数可表示为

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_i} = -S_i e_{\alpha i} \cdot H_{\text{eff}}, \quad (4)$$

式中

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H + H_{A, i} + \sum_j^{\{nm\}} 2J_{ij} S_j S_j \\ &+ \sum_{j \neq i}^{\{\text{all spins}\}} DS_j \frac{3r_{j0}(r_{j0} \cdot S_j) - S_j}{r_{ji}^3}, \\ H_{A, i} &= 2K(S_i \cdot \mu_i) \mu_i. \end{aligned}$$

能量的二阶导数可表示为

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_j \partial \alpha_i} = \begin{cases} + S_i (S_{0i} \cdot H_{\text{eff}}) - 2K(e_{\alpha i} \cdot \mu_i) & i = j, \\ - 2J_{ij} S_i S_j e_{\alpha i} \cdot e_{\alpha j} - DS_i S_j \left[\frac{3r_{j0}(r_{j0} \cdot e_{\alpha j}) - e_{\alpha j}}{r_{ji}^3} \right] \cdot e_{\alpha i} & i \neq j. \end{cases} \quad (5)$$

同理, 可以得到其他的一阶和二阶能量导数.

能量变化量可表示为

$$\delta E = T \cdot d\theta + \frac{1}{2} d\theta \cdot Q \cdot d\theta, \quad (6)$$

其中,

$$d\theta = ((\alpha_1, \beta_1), (\alpha_2, \beta_2), \dots, (\alpha_N, \beta_N)),$$

$$T = \left(\left(\frac{\partial E}{\partial \alpha_1}, \frac{\partial E}{\partial \beta_1} \right), \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha_2}, \frac{\partial E}{\partial \beta_2} \right), \dots, \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha_N}, \frac{\partial E}{\partial \beta_N} \right) \right),$$

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_1^2} & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_1 \partial \beta_2} & \dots \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_1^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_1 \partial \beta_2} & \dots \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_2^2} & 0 & \dots \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_1 \partial \beta_2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_1 \partial \beta_2} & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_2^2} & \dots \\ & & & \ddots & \\ & & & & \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_N^2} & 0 \\ & & & & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta_N^2} \end{pmatrix}.$$

(6) 式中 $d\theta$ 是个矢量, 表示所有自旋的改变量, 其每个矩阵元 (α_i, β_i) 表示第 i 个自旋在 $e_{\alpha_i}, e_{\beta_i}$ 方向的投影量. T 是扭矩矢量, 表示能量 E 对 α_i, β_i 的一阶偏导. Q 表示能量 E 对 (α_i, β_i) 的二阶偏导的矩阵. 在本算法中通过迭代对初始自旋角度进行翻转计算可以得到平衡的自旋组态. 通过引入两个辅助矢量 R_m, P_m 和两个辅助量 λ_m, ε_m (m 表示迭代的次数), 可以有效地计算出平衡的自旋组态, 具体的算法描述如下.

给定一种初始自旋组态, 根据 (3)–(6) 式计算出 T 和 Q .

令 $d\theta'_0 = 0, P'_0 = -T, R'_0 = -T$, 算出辅助量 λ_0 ,

$$\lambda_0 = \frac{-R'_0 \cdot P'_0}{P'_0 \cdot Q \cdot P'_0}. \quad (7)$$

令 $d\theta'_1 = d\theta'_0 + \lambda_0 P'_0, R'_1 = R'_0 - \lambda_0 Q \cdot P'_0$, 算出辅助量 ε_0 ,

$$\varepsilon_0 = R'_1 \cdot Q \cdot P'_0 / (P'_0 \cdot Q \cdot P'_0). \quad (8)$$

令 $P'_1 = -R'_1 + \varepsilon_0 P'_0, d\theta_0 = d\theta'_1, P_0 = P'_1, R_0 = R'_1$, 依次可得到 $\lambda_1, \varepsilon_1, \lambda_2, \varepsilon_2, \dots, \lambda_m, \varepsilon_m$. 具体表示式为

$$\lambda_m = \frac{-R_m \cdot P_m}{P_m \cdot Q \cdot P_m}. \quad (9)$$

令 $d\theta_{m+1} = d\theta_{m-1} + |\lambda_m| P_m, R_{m+1} = R_m + \lambda_m Q \cdot P_m$, 可得

$$\varepsilon_m = R_{m-1} \cdot Q \cdot P_m / (P_m \cdot Q \cdot P_m) \quad (10)$$

及 $P_{m+1} = -R_{m-1} + \varepsilon_m P_m$, 最后可求得

$$\delta E_{m+1} = T \cdot d\theta_{m+1} + \frac{1}{2} d\theta_{m+1} \cdot Q \cdot d\theta_{m+1}. \quad (11)$$

当满足 $|\delta E_{m+1}| < 1.2 |\delta E_m|$ 且 $\delta E_{m+1} \delta E_m < 0$, 系统收敛. 这时系统对应一种自旋组态, 若该组态每个自旋都满足 $e_{\alpha_i} \cdot H_{\text{eff}} < 10^{-4}, e_{\beta_i} \cdot H_{\text{eff}} < 10^{-4}$, 即自旋 S_i 平行于有效场 H_{eff} , 则系统达到稳定态. 在迭代过程中, 当 $d\theta_{\text{max}} > 0.1$ 时, 需重整 $d\theta$, 即让 $d\theta = d\theta \times (0.1/d\theta_{\text{max}})$ ($d\theta_{\text{max}}$ 是 $d\theta$ 矩阵中的最大单元). 系统的磁化强度计算公式为

$$M = \sum_{i=1}^N S_i^z / N. \quad (12)$$

最近我们已经用 Monte Carlo 方法成功地研究了磁性薄膜的磁相变和纳米磁体的磁电阻效应, 本研究所采用的模拟方法详见文献 [26, 27].

3. 结果和讨论

3.1. 阶梯效应

图 1(a) 给出了基态下铁磁/反铁磁混合系统在 $K=1, J_{AA}=1, D=0.15, X=0.72$ 下分别用微磁学和 Monte Carlo 方法计算得到的磁滞回线, 从图中可以看到两种计算方法得到的结果相当符合, 它们都呈现出明显的阶梯状的磁滞回线, 在 $H=4.7, 2.5, 0.2, -1.3, -2.8, -5.3$ 发生跳跃. 图 1(b) 给出了 $K=1, J_{AA}=1, D=0$ 的混合系统基态下 $X=0.2, 0.5, 0.72, 1.0$ 时的磁滞回线, 从图中可以看出当 $X=1$

时系统为完全铁磁性,呈现矩形的磁滞回线;当 $X = 0.72$ 时,磁滞回线呈阶梯状;当反铁磁性原子逐渐增多,如 $X = 0.5$ 时,磁滞回线阶梯数增多;当反铁磁性原子占多数时,如 $X = 0.2$,磁滞回线仍表现出阶梯特征,但矫顽力为零.在反铁磁/铁磁混合系统中类似的阶梯效应已经被发现^[18-20],特别是 Paduan-Filho 等人在掺杂反铁磁体观察到了阶梯效应^[28].下面以一维 Ising 模型为例解释产生此阶梯效应的原因.图 2 给出了包含 10 个自旋的一维简单

Ising 模型图,其体系能量为 $E = - \sum_{ij} J_{ij} (S_i \cdot S_j) - \sum_i (H \cdot S_i)$ 若反铁磁性原子有 3 个,基态下对应存在三个向下自旋“1”、“2”、“3”则在不加场的情况下系统能量为

$$E_0 = -4J_F \times 1 - 5J_{AF} \times (-1), \quad (13)$$

式中 J_{AF} 表示反铁磁性交换常数, J_F 表示铁磁性交换常数.

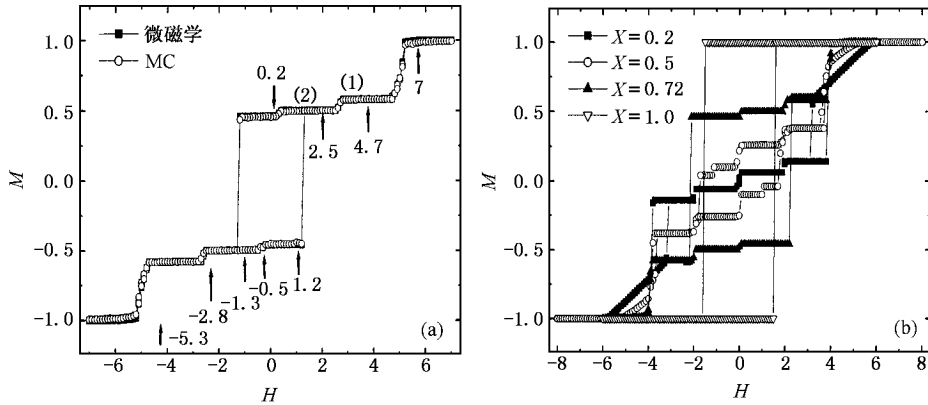


图 1 基态下铁磁/反铁磁混合系统在不同参量下的磁滞回线 (a) $K=1, J_{AA}=1, D=0.15, X=0.72$ 的混合系统 (b) $K=1, J_{AA}=1, D=0$ 的混合系统

设加外磁场 H_1 后,使得自旋“1”向上翻转,则系统能量变为

$$E_1 = -4J_F \times 1 - 2J_{AF} \times 1 - 3J_{AF} \times (-1) - 6H_1. \quad (14)$$

要使自旋向上翻转有效,则系统能量必须减小,即要求

$$E_1 - E_0 = -4J_{AF} - 6H_1 < 0, \quad (15)$$

即

$$H_1 > -\frac{2}{3}J_{AF}. \quad (16)$$

综上所述,要使自旋“1”翻转,外加磁场必须满足(16)式,此时 H_1 即为临界场,其大小为 $H_{c1} = -\frac{2}{3}J_{AF}$. 设 $J_{AF} = -1, |S_i| = 1$, 则 $H_{c1} = \frac{2}{3}$. 根据(12)式可以得到,基态时,系统的磁化强度 $M = 0.4$. 自旋“1”翻转后, $M = 0.6$.

继续加大磁场,让自旋“1”和“2”都向上翻转,则系统能量变为

$$E_2 = -4J_F - 4J_{AF} \times 1 - J_{AF} \times (-1) - 8H_2. \quad (17)$$

同理,在自旋“1”向上翻转的基础上让自旋“2”

又翻转的条件是

$$E_2 - E_1 = -4J_{AF} - 8H_2 + 6H_1 < 0. \quad (18)$$

同理可得到临界场 $H_{c2} = -\frac{1}{2}J_{AF} + \frac{3}{4}H_1 = 1$,

此时对应的 $M = 0.8$. 同理,得到在自旋“1”、“2”向上翻转的基础上,使自旋“3”翻转的临界场 $H_{c3} = 1$, 其对应饱和状态, $M = 1.0$. 因为 $H_{c2} = H_{c3}$, 故中间的亚稳态 ($M = 0.8$) 直接跳到饱和态. 综合上面的分析,可以把磁化强度随外磁场的变化如图 3 所示. 它非常清楚地表现出阶梯效应. 从图中可以看到,当 $0 < H < H_{c1}$, 自旋组态处在基态(即第一个台阶); 当 $H_{c1} < H < H_{c2}$, 自旋“1”翻转而自旋“2”和“3”保持向下,系统处在第二个台阶; 当 $H > H_{c2}$ (H_{c3}), 系统饱和. 从以上分析可以得出结论: 在混合磁性链中,包含一定数目的反铁磁性原子是产生阶梯效应的原因. 只要把单个自旋视为原子团,就可以将一维 Ising 模型得到的阶梯效应原理推广到二维 Heisenberg 模型. 下面通过系统自旋组态随外磁场的变化进一步说明产生阶梯效应的原因.

首先,先引入一种表征自旋组态变化的方法.

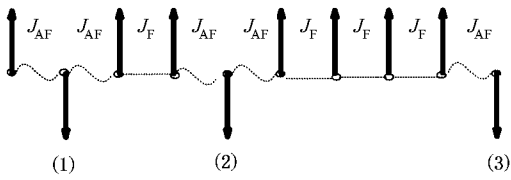


图 2 一维铁磁反铁磁混合 Ising 模型

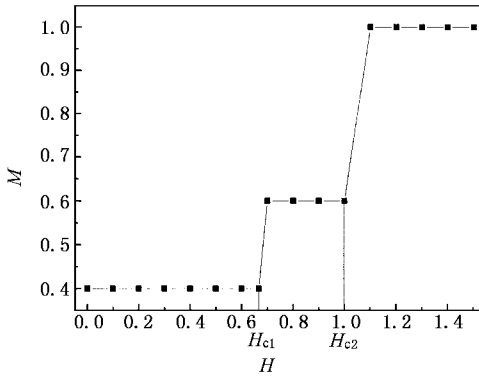


图 3 一维简单 Ising 模型的阶梯效应

图 4 (a) (b) 分别给出了某系统在 $H = 0, H = 2.3$ 的自旋组态及两组态变化. 从图 4 (a) (b) 可以看到自旋方向大多为竖直向上, 且两图比较相近, 为了更好地观察两自旋组态的变化情况, 将图 4 (a) (b) 中各格点的相应自旋取向角进行相减. 假设图 (a) (b) 同一格点自旋取向角分别为 θ_1, θ_2 , 其取向角变化为 $\theta = \theta_2 - \theta_1$. 若 $\theta_1 = \theta_2$, 即自旋组态不发生变化. 若令自旋组态不发生变化所对应的自旋取向的长度为 0, 则令此时对应的取向变化图为空白; 若 θ 为一有限值, 即自旋组态发生变化, 则格点取向变化用具有一定长度和 θ 取向的箭号表示, 如图 4 (c) 所示. 特别当 $\theta_2 - \theta_1 = \pi$ 时, 即自旋从负向转向正向, 实现完全翻转, 则产生一个向左的箭号. 因此, 图 4 (c) 表示两自旋组态变化结果的示意图, 其取向角表示两自旋组态相应格点取向角的变化, 图中空白处代表加场后自旋组态不变的原子, 向左的箭号代表完全翻转的原子, 箭号的个数即表示了翻转原子的个数, 从而可以更清楚地表征了系统自旋组态的变化.

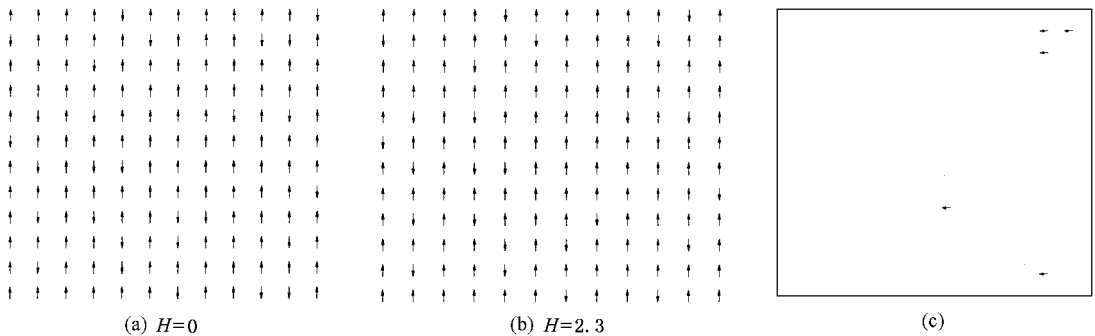


图 4 自旋组态及两组态变化结果的示意图. (a) $H = 0$ 系统的自旋组态, (b) $H = 2.3$ 系统的自旋组态 (c) $H = 0, H = 2.3$ 两系统组态变化结果的示意图

当 $X = 1$ 时, 系统为完全铁磁性, 在饱和状态下系统磁矩平行排列, 当外加磁场反向减小到一定值, 磁场足以克服各向异性, 使磁矩一致翻转到相反方向, 此时表现出的是一种集体运动, 磁滞回线呈矩形. 当反铁磁性原子或原子团的掺入后, 在饱和磁场的作用下, 所有自旋趋于平行排列; 以反铁磁性原子或原子团为中心的自旋原子团由于反铁磁性耦合要求自旋反平行排列时能量比平行排列时能量更低, 故当外加磁场逐渐反向减小, 这些原子或原子团先产生翻转, 集体运动被分解并产生阶梯的磁化. 这种行为与 Vogel 等人在正方形和三角形格点研究中用某一自旋近邻具有的反铁磁键的数目分析阶梯效

应的原理是类似的^[19, 20]. 对近邻环境, 导致翻转的先后不一, 因此在磁滞回线形成不同的阶梯. 采用类似图 4 (c) 的表示方法, 以图 1 (a) 反磁化过程为例, 并考虑以 $H = 7.0$ 的自旋组态(饱和态)为基准, 来研究各个阶梯的转变点的自旋组态变化. 图 5 给出了对应于图 1 (a) 反磁化过程中各个阶梯的转变点的自旋组态变化. 从图 5 可以看出当外加磁场减小到 $H = 4.7$ 时, 某些原子团满足自旋翻转的条件而产生翻转引起一个阶梯, 当外加磁场继续减小, 此时的外加磁场还不足以使其他原子团产生自旋翻转, 系统自旋组态保持不变, 对应于图 1 (a) 中的台阶 (1); 直到外加磁场减小到 2.5 时, 另一些磁性原子团满

足自旋翻转所需场的条件,使磁滞回线产生跳跃;同理,当外加磁场分别为 0.2, -1.3, -2.8, -5.3

时,都有相应一些磁性原子团满足翻转条件,从而产生如图 1(a)所示的阶梯状的磁滞回线.

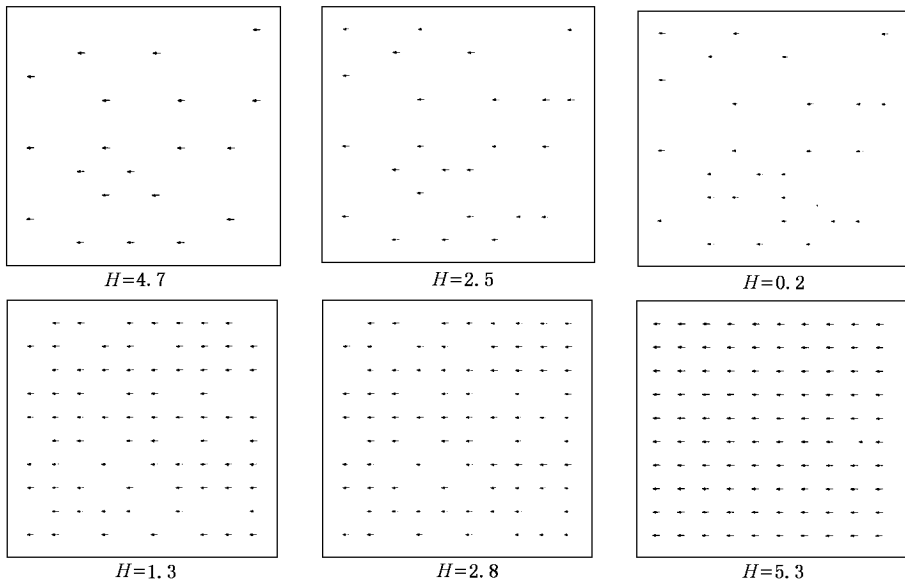


图 5 基态下 $K=1, J_{AA}=1, D=0.15, X=0.72$ 的混合系统反磁化过程在各翻转场下的自旋组态变化

3.2. 各向异性常数 K 、偶极相互作用常数 D 、铁磁交换作用常数 J_{AA} 对矫顽力的影响

图 6 给出了用微磁学和 Monte Carlo 方法计算得到的基态下 $J_{AA}=1, D=0$ 的混合磁性系统的矫顽力 H_c 随各向异性常数 K 、铁磁掺杂量 X 的变化. 通过计算,发现微磁学和 Monte Carlo 方法的计算结果基本是一致的,如图 6 所示给出了 $K=1.0$ 的两种模拟结果. 从图 6 可以看到在 $0.5 \leq X \leq 1.0$ 区域,矫顽力 H_c 随各向异性常数 K 的增大而增大. 而在 $0.2 \leq X \leq 0.4$ 区域,矫顽力随各向异性常数的变化表现得比较无规. 在 X 值小处,矫顽力值为 0,这是由于磁滞现象是铁磁性材料发生不可逆磁化的体现,当铁磁性原子掺杂量很少,反铁磁性原子占主导时,磁滞现象消失. 各向异性常数 K 越大,系统反磁化需克服的各向异性能就越大,因此所需的矫顽力就变大. 同时还可以看到在混合系统中矫顽力 H_c 不仅与各向异性常数有关,而且与铁磁性原子的掺杂量 X 有关.

图 7(a)(b)分别给出了基态下 $K=1, J_{AA}=1$ 时混合磁性系统矫顽力 H_c 随 D 和 X 变化的模拟结果及 $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ 和 $(\text{SiO}_2)_{-x}\text{Fe}_x$ 颗粒膜的矫顽力随 Fe 掺杂量变化关系的实验结果^[4,5]. 比较图中的模拟和实验结果,可以发现两者的变化趋势是相当一致的.

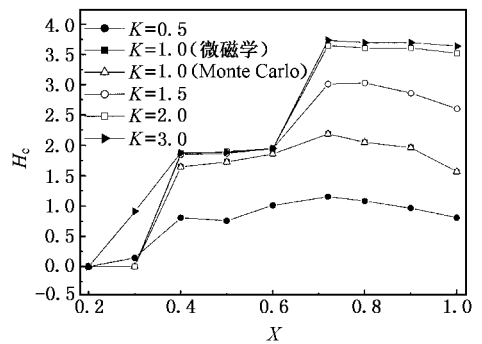
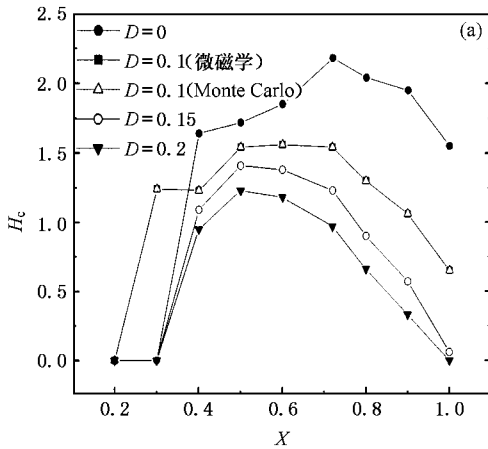


图 6 基态下 $J_{AA}=1, D=0$ 的混合系统矫顽力 H_c 随各向异性常数 K 、铁磁性原子掺杂量 X 的变化关系

矫顽力 H_c 随铁磁掺杂量先增大后减小,且在中间位置出现峰值. 对曲线中出现峰值行为可作如下解释:系统为完全铁磁性时,系统磁矩在饱和磁场下平行排列,要使系统磁矩一致翻转到相反方向的饱和,仅需要克服一定大小的各向异性能;当少量掺杂反铁磁性原子或原子团时,铁磁和反铁磁性原子或原子团间的反铁磁耦合产生强的阻碍作用,故此时系统磁矩翻转不仅要克服各向异性能,还要克服反铁磁耦合能,从而导致矫顽力的增大;当反铁磁性原子掺杂越多,产生的势垒就越大,矫顽力就越大. 但是当反铁磁性原子数目增加时,铁磁性原子间的集体效应逐步被削弱,取而代之的是包含不同反铁磁原

子数目的不同尺寸的原子团的数目逐步增加,这一过程在磁滞回线上表现为矩形的磁滞回线的面积逐渐减小,而阶梯逐步增加,当 X 很小时,导致矩形的磁滞回线完全消失,此时矫顽力为零,如图 1 所示.另外,从模拟的结果可以看到,当 $0.4 \leq X \leq 1.0$ 时 H_c 随偶极相互作用常数 D 的增大而减小,且 H_c-X 峰值随 D 的增大而左移.在文献 [29, 30], 我们研究



了磁性薄膜中单轴各向异性与偶极相互作用的竞争导致了自旋重取向,单轴各向异性使系统自旋取向趋向易轴(Z 轴)方向,而偶极相互作用却自旋取向趋于垂直易轴方向.因此 D 的作用等效于减小 K 的作用. D 越大对 K 的作用抵消越明显.因此, D 的增加将使矫顽力减小.

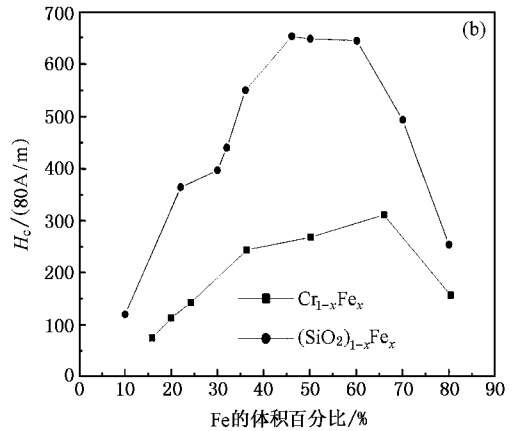


图 7 (a) 基态下 $K=1, J_{AA}=1$ 的混合系统矫顽力 H_c 随偶极相互作用常数 D 、铁磁性原子掺杂量 X 的变化关系, (b) $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ 和 $(\text{SiO}_2)_{1-x}\text{Fe}_x$ 颗粒膜的矫顽力随 Fe 掺杂量变化关系的实验结果^[4, 5]

图 8 给出了基态下 $K=1, D=0$ 的混合磁性系统的矫顽力 H_c 随 J_{AA} 、铁磁掺杂量 X 的变化.从图中可以看出,当 $0.5 \leq X \leq 1.0$ 时,矫顽力随交换相互作用常数的增大而增大,当 $0.2 \leq X \leq 0.5$ 时,表现得比较无规.铁磁性原子间相互作用越大,要破坏它们之间的耦合所需能量就越大,系统反磁化越不容易,矫顽力就越大.

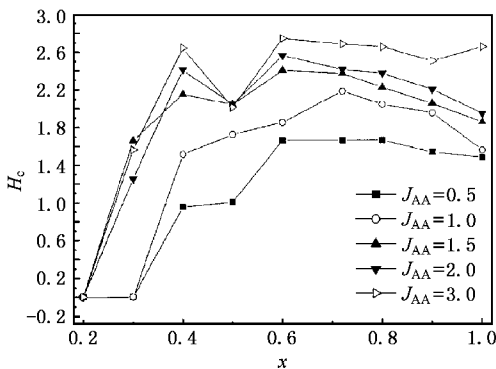


图 8 基态下 $K=1, D=0$ 的混合系统矫顽力 H_c 随铁磁交换作用常数 J_{AA} 、铁磁性原子掺杂量 X 的变化关系

3.3. 温度特性

图 9 给出了不同掺杂量及 $K=1, J_{AA}=1, D=0$ 下混合磁性系统的矫顽力随温度的变化.从图中可以看出在给定 X 值情况下,混合磁性系统的矫顽力随温度的升高而下降,不同 X 值对应的 H_c-T 曲线的变化快慢也不一样.磁性薄膜的矫顽力的温度效应在实验和理论方面都是人们感兴趣的课题^[31],一般用 T^α 律来表征这一关系, $H_c = H_0(1 - \beta T^\alpha)$.通过拟合,我们发现图 9 的结果很好地满足 T^α 律,这与实验结果是符合的^[5, 32].不同 X 下的 α 值显示在图 10.从图中可以看出温度指数 α 随铁磁性原子掺杂量的变化关系存在一个峰值和底谷.由于随着温度的升高,系统自旋组态变得更无序,使得反磁化更容易,导致了矫顽力的减小.但在混合磁性系统中,由于反铁磁性原子或原子团的掺入,使得矫顽力随温度的变化过程中还需考虑反铁磁耦合及反铁磁原子掺杂量等因素,导致温度指数变化的复杂性,这方面的问题还有待进一步研究.

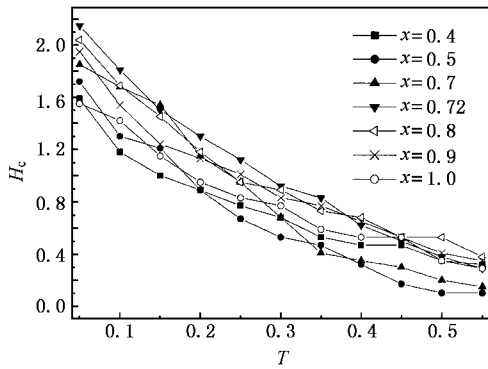


图9 各不同铁磁性原子掺杂量 x 值的 $K=1, J_{AA}=1, D=0$ 的混合磁性系统的矫顽力随温度的变化

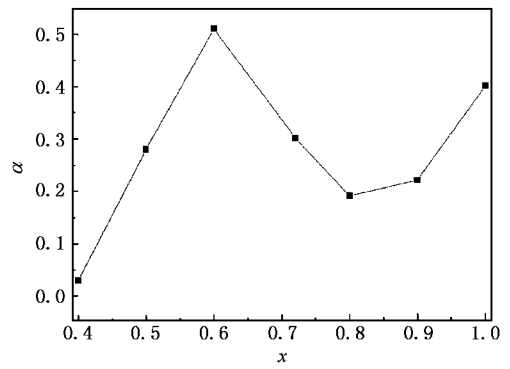


图10 $K=1, J_{AA}=1, D=0$ 的混合磁性系统的 H_c-T 曲线指数随铁磁性原子掺杂量的变化

4. 结 论

本文通过微磁学及 Monte Carlo 方法研究了铁磁/反铁磁混合磁性膜的磁化行为,重点研究基态情况下系统的磁滞回线、自旋组态,及铁磁交换作用常数 J_{AA} 、各向异性常数 K 、偶极相互作用常数 D 、铁磁性原子掺杂量 x 对矫顽力 H_c 的影响.同时还模拟计算了矫顽力 H_c 的温度特性.结果表明,在混合磁性薄膜中由于包含不同反铁磁原子的掺杂量的不同尺

寸的原子团对外加磁场所产生不同响应,从而使混合系统磁滞回线存在明显的阶梯效应;在 $0.5 \leq x \leq 1.0$ 的铁磁/反铁磁混合系统,基态下矫顽力 H_c 随 K 和 J_{AA} 的增大而增大,但随 D 的增大而减小;矫顽力随铁磁性原子或原子团掺杂量的变化存在峰值,且 D 和 J_{AA} 对峰值的位置有一定的影响, D, J_{AA} 的增大都会使得峰值左移.不同 x 下矫顽力随温度的变化规律可以用 T^α 律很好地描述,但 α 值随 x 却有复杂的变化,有待进一步研究.

- [1] Baibich M N , Broto J , Nguyen van Dau A , Petroff F , Etienne P , Creuzet G , Friedrich A and Chazelas 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472
- [2] Xiao J Q , Jiang J S and Chien C L 1992 *Phys. Rev. B* **46** 9266
- [3] Xiao G , Wang J Q and Xiong P 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 420
- [4] Christodoulides J A , Murthy A S and Hadjipanayis G C 1995 *Mater. Sci. Engin. A* **204** 30
- [5] Christodoulides J A , Shevchenko N B and Hadjipanayis G C 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 5558
- [6] Bauer J , Seeper M , Zem A and Kronmuller H 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 1667
- [7] Saber M and Tucker J W 1992 *J. Magn. Magn. Mater.* **114** 11
- [8] Staats M , Nowak U , Usadel K D 1998 *J. Magn. Magn. Mater.* **177** 85
- [9] Paduan-Filho A *et al* 1995 *J. Magn. Magn. Mater.* **140** 1925
- [10] Nowak U and Usadel K D 1992 *Phys. Rev. B* **46** 8329
- [11] Bayong E and Diep H T 1999 *Phys. Rev. B* **59** 11919
- [12] Zhang W M and Saslow W M 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10204
- [13] Boubekeur E H and Diep H T 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5163
- [14] Spinato D , Ben Youssef J , Le Gall H 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **240** 254
- [15] Binek Ch , Xi Chen , Hochstrat A , Kleemann W 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **240** 257
- [16] Diény B , Speriosu V S , Parkin S S P , Gurney B A , Wilhoit D R and Mauri D 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1297
- [17] Stamps R L 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **242** - 245 139
- [18] Viitala E , Merikoski J , Manninen M and Timonen J 1996 *Phys. Rev. B* **55** 11541
- [19] Vogel E E and Cartes J , 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3325
- [20] Vogel E E , Cartes J , Vargas P , Altbir D 2000 *Physica B* **284** - 288 1211
- [21] Bruix U , Schneider T , Acet M and Wassermann E F 1995 *Phys. Rev. B* **52** 3042
- [22] Schneider T , Acet M and Wassermann E F 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 6559
- [23] Hughes G F 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 5306
- [24] Kodama R H and Berkowitz A E 1999 *Phys. Rev. B* **59** 6321
- [25] Weng Z Z , Feng Q and Huang Z G 2004 *Chin. J. Comput. Phys.* **21**(3) 339 [in Chinese] 翁臻臻、冯 倩、黄志高 2004 计算物理 **21**(3) 339]
- [26] Feng Q , Huang Z G , Du Y W , 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2906 [in Chinese] 冯 倩、黄志高、都有为 2003 物理学报 **52** 2906]
- [27] Huang Z G , Chen Z G , Pen K , Wang D H , Zhang W Y , Zhang F M and Du Y W *Phys. Rev. B* **69** 094420

- [28] Paduan-Filho A , Becerra C C , Barbeta V B , Shapira Y Campo J and Palicio F 1995 *J. Magn. Magn. Mater.* **140** – **144** 1925 (1) 49 in Chinese [肖 艳、冯 倩、黄志高 2004 计算物理 **21**(1) 49]
- [29] Huang Z G , Chen Z G , Xiao Y , Li Y S and Du Y W 2003 *Mater. Sci. Engin.* **B99** 536 [31] Pfeiffer H and Schuppel W 1990 *Phys. Status Solidi A* **119** 259
- [30] Xiao Y , Feng Q , Huang Z G , 2004 *Chin. J. Compu. Phys.* **21** [32] Antony Ajan ,Abarra E N ,Acharya B R ,Inomata A ,Okamoto I ,and Shinohara M 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1075

Study on the coercivity and step effect of mixed magnetic films by micromagnetism and Monte Carlo simulation *

Weng Zhen-Zhen¹⁾ Feng Qian¹⁾ Huang Zhi-Gao^{1,2)} Du You-Wei²⁾

¹⁾(School of Physics and Optoelectronics Technology , Fujian Normal University , Fuzhou 350007 , China)

²⁾(National Laboratory of Solid State Microstructures , Nanjing University , Nanjing 210093 , China)

(Received 13 October 2003 ; revised manuscript received 2 January 2004)

Abstract

The magnetic properties of ferromagnetically and antiferromagnetically mixed films are simulated by micromagnetism method based on the principle of energy minimum and Monte Carlo technology. The hysteresis loops , spin configurations , and the influences of exchange constant J_{AA} , uniaxial anisotropy constant K , dipolar interaction constant D and diluted ratio of ferromagnetic atom X on the coercivity H_c at the ground states are studied systematically for the systems studied. At the same time , the temperature dependence of the coercivity is calculated. The simulated results indicate that : (1) a step-like hysteresis is evidently observed in the mixed magnetic films , and the result calculated by a simple Ising model reveals that the step-like effect can be attributed to the different response of the clusters with different size and different diluted ratio of antiferromagnetic atom on the external field ; (2) at the ground states , as $0.5 \leq X \leq 1.0$, the value of H_c increases with increasing values of K , J_{AA} , but decreases with increasing value of D ; (3) a peak exists in the H_c - X curves. These simulated results explain the experimental facts about the granular films with antiferromagnetic coupling. The T dependence of the value of H_c for the films with different magnitude of X can be well described by the law of T^α . But the value of α has a complex variation with the change of X .

Keywords : Monte Carlo , micromagnetism , step effect , mixed magnetic system , coercivity

PACC : 7540M , 7560E , 7530H

* Project supported by the Foundation for University Key Teacher by the Ministry of Education , the Natural Science Foundation of Fujian Province (Grant No. E0320002) and the National Key Project for Basic Research of China (Grant No. 1999064508).