

掺杂下铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的增强^{*}

马 梅 蔡 蕾 王兴福 胡经国[†]

(扬州大学物理科学与技术学院,扬州 225002)
(2006 年 3 月 15 日收到,2006 年 6 月 27 日收到修改稿)

采用了 Monte-Carlo 方法,讨论了反铁磁层中不同非磁性掺杂浓度下,铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的温度特性. 模拟结果显示:反铁磁层中非磁性掺杂能导致铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的增强. 同时,交换偏置随非磁性掺杂浓度的变化存在极大值,即同一温度下交换偏置随掺杂浓度的变化是非单调的. 并且,随着温度的升高交换偏置的最大值所对应的掺杂浓度向浓度低的方向移动. 它和 Hong Jung-Il 等人的实验结果完全一致. 究其原因在于反铁磁层相应的自旋排布、磁畴结构等随掺杂浓度的改变发生大的变化,当其正向磁畴和负向磁畴都形成连通的网络结构时,系统的交换偏置达最大. 比较了随机掺杂与规则掺杂的模拟结果. 模拟结果表明规则掺杂能够获得比随机掺杂更大的交换偏置,进一步表明了铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的特性与铁磁/反铁磁界面磁畴结构密切相关.

关键词: Monte-Carlo 方法, 随机掺杂, 规则掺杂, 交换偏置和矫顽场

PACC: 7570C, 7560E, 7530H

1. 引 言

1956 年 Meiklejohn 和 Bean 在 $\text{Co}(\text{铁磁})/\text{CoO}(\text{反铁磁})$ 混合系统中发现了交换偏置^[1], 所谓交换偏置是指铁磁体的磁滞回线偏离原点的偏离量. 1991 年 Dieny 在设计的以铁磁/反铁磁双层膜为基础的自旋阀中发现了有增强的磁电阻效应^[2], 使得铁磁/反铁磁双层膜在磁传感器、磁记录读出头和随机存储器等方面得到了广泛地应用. 随后对铁磁/反铁磁双层膜中相关物理性质特别对其交换偏置等的研究亦成为人们关注的热点之一. 在实际应用中, 其磁学器件如只读探头等需要有大的交换偏置, 并且要在不同的温度环境下工作, 所以研究如何获得大交换偏置、且有好的热稳定性的铁磁/反铁磁系统不仅在理论上十分重要的价值, 而且在实践上也有广泛的应用背景.

实验结果表明铁磁/反铁磁混合系统中的交换偏置和矫顽场的大小以及温度特性依赖于组成材料的组分及界面微观结构^[3-12], 冷磁场的取向以及制备工艺和具体的生长条件等等^[13-16]. Eftaxias 等用 Monte-Carlo 方法模拟一个铁磁/反铁磁球形微粒, 其

中外壳为反铁磁层, 核为铁磁层. 模拟结果显示减小核的厚度以及增加外壳的厚度都会导致交换偏置的增强, 并且界面交换耦合常数和反铁磁间耦合常数的增加也会增强交换偏置^[17]; Nowak 等用此方法模拟了铁磁/反铁磁双层膜模型, 认为在反铁磁体中而不是在界面层中掺杂会增强交换偏置, 并且交换偏置随温度的增大而减小, 在 Blocking 温度处趋近于零^[18, 19]. 最近, Hong 等人在研究 Co/CoO 铁磁/反铁磁双层膜系统交换偏置特性时, 发现当在 CoO 构成的反铁磁层中掺入非磁性的原子 Mg 后, 其交换偏置得到了增强. 且随着 Mg 原子掺杂浓度的增大, 交换偏置先增大后减小. 本文亦采用 Monte-Carlo 方法^[20, 21], 通过非磁性掺杂浓度以及温度的改变, 翔实地研究了非磁性掺杂下铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置及矫顽场的特性, 并讨论了不同的掺杂方式对系统交换偏置的影响. 结果表明: 不同的掺杂浓度下随着温度的增加, 交换偏置和矫顽场都逐渐减小, 最后趋近于零. 但它们随温度变化的趋势因非磁性掺杂浓度的改变有大的不同. 此外, 交换偏置随非磁性掺杂浓度的变化存在极大值, 即同一温度下交换偏置随着掺杂浓度的增大先增大后减小. 这与 Hong 等人的实验结果很好地符合^[22]. 为了究其原

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10347118)和江苏省高校自然科学基金(批准号: 2006KJB140133)资助的课题.

[†] E-mail: hujgz@263.net

因,我们考察了不同掺杂浓度下铁磁/反铁磁界面处反铁磁层的自旋微结构.发现当其正向磁畴和负向磁畴都形成连通的网路结构时,系统的交换偏置达最大.本文还比较了随机掺杂与规则掺杂的模拟结果.模拟结果表明规则掺杂能获得比随机掺杂更大的交换偏置,可满足有较大的交换偏置和较小的矫顽场的实际应用需要.

2. 模 型

本文的模型是铁磁/反铁磁双层膜,一层是纯的铁磁材料,而另一层为掺杂的反铁磁材料.假定膜面为 $x-z$ 平面, y 轴垂直于膜面.利用 Heisenberg 模型将系统的哈密顿量表示为

$$\begin{aligned} H = & -J_{\text{FM}} \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ & - \sum_i (d_z s_{iz}^2 + d_x s_{ix}^2 + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}) \\ & - J_{\text{AFM}} \sum_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \\ & - \sum_i \epsilon_i (k_z \sigma_{iz}^2 + \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{H}) \\ & - J_{\text{INT}} \sum_{i,j} \epsilon_i \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j, \end{aligned} \quad (1)$$

式中 \mathbf{S}_i , $\boldsymbol{\sigma}_i$ 分别表示铁磁层和反铁磁层第 i 个格点的自旋.哈密顿量的第一、二项描述了铁磁层的能量, d_x , d_z 表示铁磁层各向异性常数, \mathbf{H} 为外磁场.第三、四项为掺杂的反铁磁层的能量,对于掺杂的格点 $\epsilon_i = 0$,而其他格点 $\epsilon_i = 1$, k_z 为反铁磁层各向异性常数.最后一项描述了铁磁层和反铁磁层间的交换耦合能.为研究方便,本文只考虑最近邻相互作用,交换耦合常数分别为 J_{FM} , J_{AFM} 和 J_{INT} ,分别表示铁磁层内、反铁磁层内以及铁磁层和反铁磁层界面交换耦合常数.在我们的模拟中,平面格点大小为 128×128 ,在平面方向采用周期性边界条件,在垂直平面方向采用自由边界条件,并取 $J_{\text{FM}} = -2J_{\text{AFM}} = 2J_{\text{INT}}$.

在本文的模拟计算中,考虑简单立方晶格结构,对于这种结构居里温度 $T_C = 2.9$,奈尔温度 $T_N = 1.5^{[23]}$,单位是 J_{FM}/k_B ,我们先模拟冷却场过程,将温度从 $T = 2.9$ (介于铁磁层的居里温度和反铁磁的奈尔温度之间)降到 $T = 0.1$ (低于奈尔温度).然后去掉冷却磁场,模拟出不同温度下的磁滞回线,最后通过计算得到交换偏置和矫顽场.

3. 结果与讨论

我们首先模拟了随机掺杂的情况,分别考察了在同一掺杂浓度下不同温度时铁磁/反铁磁双层膜的磁滞回线.图 1 给出了铁磁/反铁磁双层膜中,掺杂浓度 $p = 0.1$ 时,温度分别在 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6 时的磁滞回线.从图 1 中可以观察到:当温度 $T = 0.1$ 时,磁滞回线偏移量最大,即交换偏置现象最明显,矫顽场也最大,并随着温度的升高,它们都逐渐减小,最后趋近于零.根据文献 [12]

$$H_{\text{EB}} = (H_{\text{C1}} + H_{\text{C2}})/2, \quad (2)$$

$$H_C = (H_{\text{C1}} - H_{\text{C2}})/2, \quad (3)$$

可以计算其相应的交换偏置 H_{EB} 和矫顽场 H_C .

图 2(a) 给出了随机掺杂浓度 $p = 0.1$ 时铁磁/反铁磁双层膜中的交换偏置随温度的变化关系.图 2(a) 显示,随着温度的增高,交换偏置非线性减小;当温度增大到一定的值后,交换偏置场趋近于 0.这是因为随着温度的升高,反铁磁层的净磁化强度减小,反铁磁自旋对铁磁自旋的扭矩作用减小,导致交换偏置也减小,最终趋于零.图 2(b) 给出了相应的矫顽场随温度的变化关系.从图 2(b) 可以发现:其矫顽场随温度变化的趋势与交换偏置的略有不同,即随着温度的增大,矫顽场几乎是线性减小的;当温度达到一定的值后,矫顽场也等于 0.

考虑到掺杂浓度的变化会改变反铁磁界面层的自旋微结构,从而影响到铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置和矫顽场.为此,我们模拟了随机掺杂方式下不同掺杂浓度时交换偏置和矫顽场随温度的变化关系.图 3(a) 给出了铁磁/反铁磁双层膜中随机掺杂方式下不同掺杂浓度时交换偏置随温度的变化情况.从图中可知,掺杂浓度的不同,其交换偏置随温度的变化趋势有小的差异,但都随着温度的增高,交换偏置减小,最后趋近于 0,且不同掺杂浓度所对应的关系曲线存在交叉现象.这说明同一温度下交换偏置随掺杂浓度的增大是非单调减小的.图 3(b) 给出了铁磁/反铁磁双层膜中的矫顽场随温度的变化关系.从图 3(b) 可知:尽管掺杂浓度不同,但矫顽场随温度的变化趋势几乎相同,都随着温度的增高而减小,最后趋于 0.为了更详细地了解交换偏置随掺杂浓度的变化情况,我们做了不同温度下交换偏置随掺杂浓度变化的关系.图 4 描述的是温度分别为 $T = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ 时交换偏置随掺杂浓度

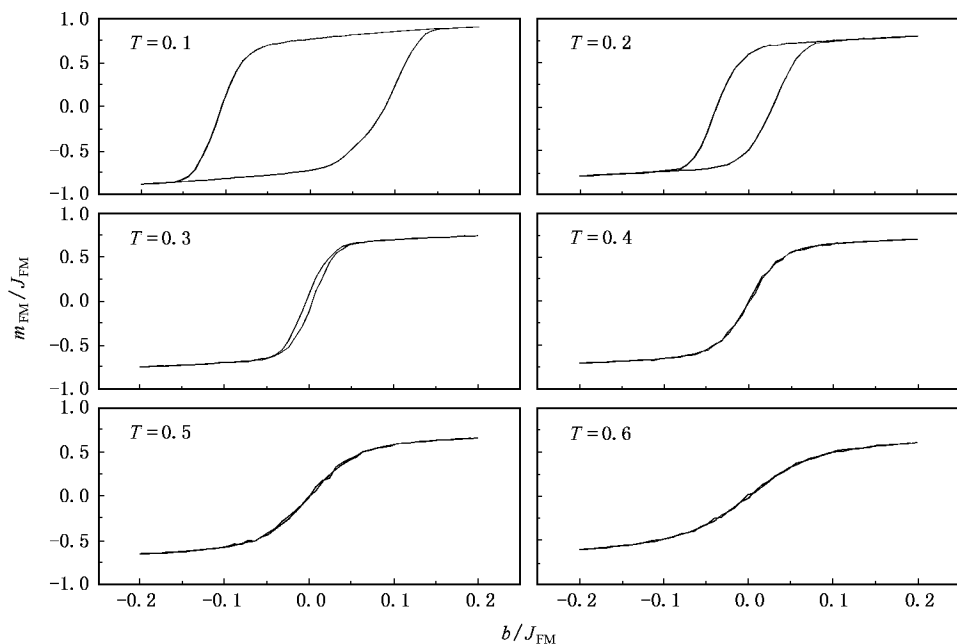


图 1 不同温度下铁磁/反铁磁双层膜中的磁滞回线(掺杂浓度 $p = 0.1$, T 为温度(单位 J_{FM}/k_B), 以下同)

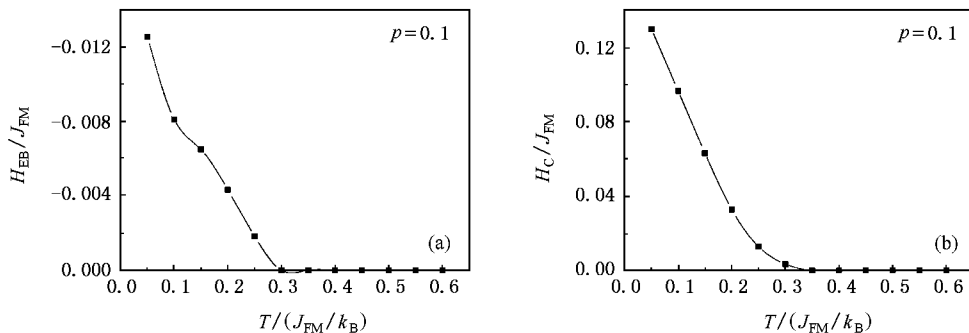


图 2 (a) 交换偏置随温度的变化关系 ; (b) 矫顽场随温度的变化关系

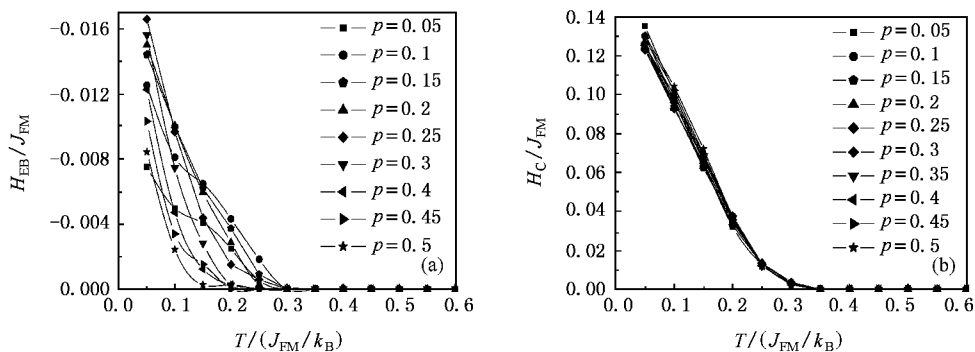


图 3 (a) 不同掺杂浓度下交换偏置随温度的变化关系 (b) 不同掺杂浓度下矫顽场随温度的变化关系

的变化关系, 从图中可以得到, 同一温度下交换偏置随着掺杂浓度的增大先增大后减小, 每条曲线都有

一个最大值, 并且不同温度时其交换偏置最大值有所不同, 并随着温度的升高交换偏置最大值所对应

的掺杂浓度向浓度小的方向移动. 造成这种现象的原因可以解释为: 刚开始掺入非磁性物质时, 有部分非磁性的原子代替了反铁磁层中的原子, 一些在掺杂原子临近的原子自旋成为未补偿的, 并且未补偿的自旋密度大致上与掺杂原子的密度成正比, 导致了在反铁磁层中未补偿的自旋密度的增加, 进而交换偏置也增加, 但是当掺杂浓度进一步地增加, 额外的掺杂原子就对创造未补偿自旋没有太大的效果, 掺杂原子替代反铁磁层中已经具有未补偿自旋的原子, 没有产生额外的未补偿自旋, 这导致了未补偿自旋密度的减少, 从而交换偏置也随之减小, 这与 Hong 等人的实验结果完全符合^[22].

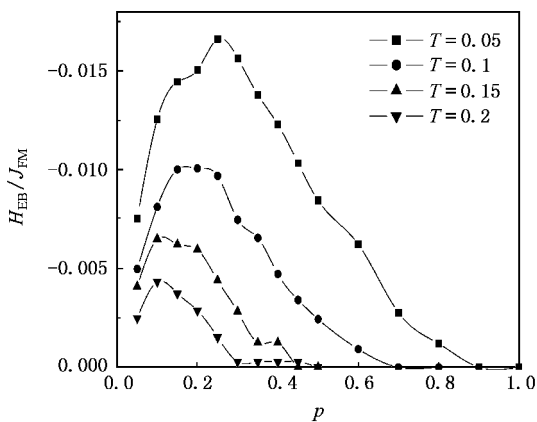
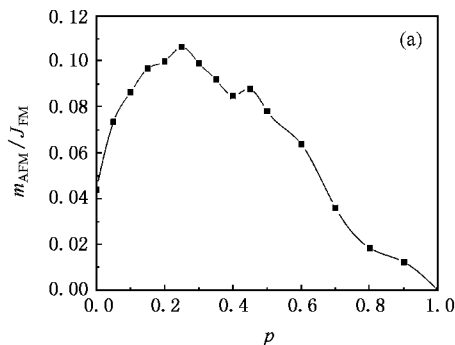


图 4 不同温度下交换偏置随掺杂浓度的变化关系

图 5 (a) 表示在外磁场为 $0.128J_{FM}$ 以及温度等于 $0.1J_{FM}/k_B$ 时, 反铁磁界面层的净磁化强度随掺杂浓度的变化关系, 从图中可以发现, 随着掺杂浓度的增大, 反铁磁界面层的净磁化强度也先增大后减小. 在掺杂浓度 $p = 0.25$ 左右时, 反铁磁界面层净磁化强度达到最大值, 此时所对应的交换偏置也较



大 (如图 5 (b) 所示). 它表明反铁磁界面层的净磁化强度是影响系统交换偏置的重要因素之一. 这也与 Hong 等人的实验结果完全相符合^[22]. 然而, 其交换偏置最大值所对应的掺杂浓度与反铁磁界面层净磁化强度最大值所对应的掺杂浓度有差异的结果又说明了还有其他因素影响系统的交换偏置. 为了更清楚地了解交换偏置在掺杂浓度变化过程中反铁磁层所起的作用, 我们还模拟了同一温度 ($T = 0.1J_{FM}/k_B$) 下不同掺杂浓度时反铁磁界面层的自旋构形 (如图 6 所示). 比较图 6 (a) (b) 和 (c), 我们发现掺入少量非磁性杂质时, 掺杂促进了反铁磁层磁畴结构的形成, 反铁磁的磁畴界总在掺杂处, 并导致了反铁磁层的净磁化强度的增加, 反铁磁对铁磁的钉扎面也增大, 从而交换偏置也增大. 但当掺杂浓度达到一定值时, 如图 6 (b) 所示, 其正向磁畴和负向磁畴都形成了连通的网路结构, 此时反铁磁层对铁磁层的钉扎能力达最大, 系统的交换偏置也达最大值. 进一步地增加掺杂浓度, 如图 6 (c) 所示, 反铁磁层磁畴结构的连通性降低, 相应的奈尔温度也降低, 独立的磁畴结构不会增加反铁磁中的净磁化强度, 反铁磁层对铁磁层的钉扎能力也降低, 使得交换偏置减少. 它表明反铁磁界面层的自旋畴结构也是影响系统交换偏置的重要因素之一. 为此我们模拟了一种规则掺杂的情况, 即掺杂方式为相隔一个格点掺入一个非磁性原子, 并与随机掺杂的情形相比较 (如图 7 所示). 模拟结果显示规则掺杂能够获得比随机掺杂大得多的交换偏置, 这是由于规则掺杂使得反铁磁磁畴分布均匀, 并形成了连通的网路结构, 所以其交换偏置大. 它也进一步地表明了铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的大小与铁磁/反铁磁界面磁畴结构密切相关.

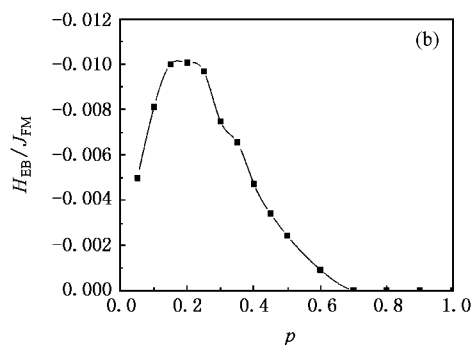


图 5 (a) 反铁磁界面层的净磁化强度随掺杂浓度的变化关系 (b) 交换偏置随掺杂浓度的变化关系

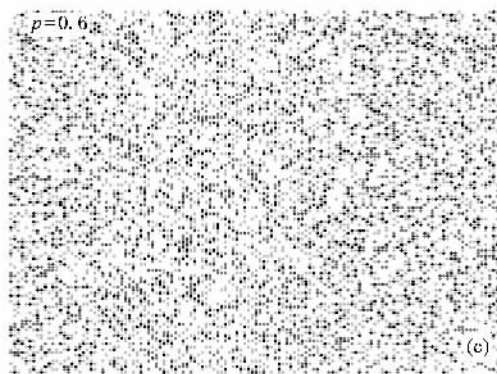
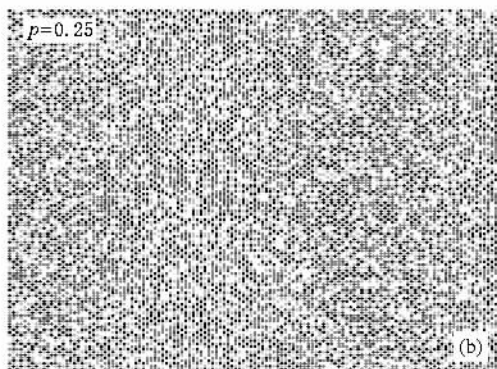
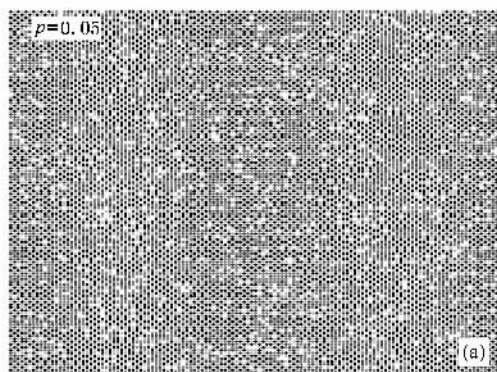


图 6 不同掺杂浓度时反铁磁界面层的自旋构形

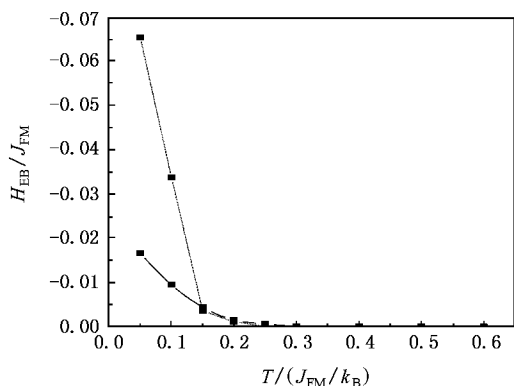


图 7 不同的掺杂方式下交换偏置随温度的变化关系(虚线表示规则掺杂,实线表示随机掺杂)

4. 结 论

本文采用了 Monte-Carlo 方法,通过改变反铁磁体内非磁性掺杂的掺杂浓度,讨论了铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的温度特性.模拟结果显示:反铁磁层中非磁性掺杂能导致铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的增强.同时,交换偏置随非磁性掺杂浓度的变化存在极大值,即同一温度下交换偏置随着掺杂浓度的变化是非单调性的.并且,随着温度的升高交换偏置的最大值所对应的掺杂浓度向浓度低的方向移动.它和文献 [22] 的实验结果完全一致.究其原因在于反铁磁层相应的自旋排布、磁畴结构等随掺杂浓度的改变发生大的变化,当其正向磁畴和负向磁畴都形成连通的网路结构时,反铁磁界面层净磁化强度较大,其对铁磁层磁化的钉扎能力最大,故系统的交换偏置达最大.本文还比较了随机掺杂与规则掺杂的模拟结果.模拟结果表明规则掺杂能够获得比随机掺杂更大的交换偏置,它也进一步地表明了铁磁/反铁磁双层膜中交换偏置的特性与铁磁/反铁磁界面微结构密切相关.

- [1] Meiklejohn W H, Bean C P 1956 *Phys. Rev.* **102** 1413
 [2] Dieny B 1994 *J. Magn. Magn. Mater* **136** 335
 [3] Nogues J, Schuller I K 1999 *J. Magn Magn Mater* **192** 203
 [4] Lin T, Mauri D, Hwang N C, Howard J K, Gorman G L 1994 *Appl. Phys. Lett.* **65** 11839
 Fujiwara H, Nishioka K, Hou C, Parker M R, Gangopadhyay S, Metzger R 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 6286

- [6] Wu X W, Chien C L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2795
 [7] Hou C H, Fujiwara H, Metzger R D 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 4528
 [8] Qian Z H, Sierstsen J M, Judy J H 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 6825
 [9] Yu G H, Chai C L, Zhu F W 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 1706
 [10] Jiang H W, Li M H, Wang A L, Zheng W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1232 (in Chinese) 姜宏伟、李明华、王艾玲、郑 鹤 2004 物理学报 **53** 1232]

- [11] Zhou X , Liang B Q , Chen L Y , Wang Y J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 492 (in Chinese) [周 勋、梁冰清、陈良尧、王荫君 2003 物理学报 **52** 492]
- [12] Hu J G , Jin G J , Ma Y Q 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 2529
- [13] Deng D S , Jin X F , Tao R 2002 *Phys. Rev. B* **65** 172402
- [14] Hu J G , Stamps R L 2006 *Chin. Phys.* **15** 1595
- [15] Li M H , Yu G H , He K , Zhu F W , Lai W Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2854 (in Chinese) [李明华、于广华、何珂、朱逢吾、赖武彦 2002 物理学报 **51** 2854]
- [16] Hu J G , Jin G J , Hu A , Ma Y Q 2004 *Eur. Phys. J. B* **40** 265
Hu J G , Jin G J , Stamps R L , Ma Y Q 2006 *J. Magn. Magn. Mater* **301** 238
- [17] Eftaxias E , Trohidou K N 2005 *Phys. Rev.* **B71** 134406
- [18] Miltenyi P , Gierlings M , Keller J , Beschoten B , Guntherodt G , Norwak U , Usadel K D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4224
- [19] Nowak U , Usadel K D , Keller J , Miltenyi P , Beschoten B , Guntherodt G 2002 *Phys. Rev. B* **66** 014430
- [20] Binder K 1984 *Applications of the Monte-Carlo method in statistical physics* (New York , Springer-Verlag)
- [21] Huang Z G , Chen Z G , Jian L Q , Ye Q Y , Wu Q Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 1602
- [22] Hong J I , Leo T , Smith D J , Berkowitz A E 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 117204
- [23] Wood D W , Dalton N W 1967 *Phys. Rev.* **159** 384

Enhancement of exchange bias with diluted antiferromagnets in FM/AFM bilayers^{*}

Ma Mei Cai Lei Wang Xing-Fu Hu Jing-Guo[†]

(Department of Physics , Yangzhou University , Yangzhou 225002 , China)

(Received 15 March 2006 ; revised manuscript received 27 June 2006)

Abstract

Based on Monte Carlo method , the characteristic of exchange bias is discussed in diluted antiferromagnets in FM/AFM bilayers by changing the dilute concentration. The simulation results show that the exchange bias in FM/AFM bilayers can be enhanced significantly by introducing nonmagnetic atoms into the AFM layers. And there is a maximum in the diagram of exchange bias as a function of the dilute concentration , i. e. , the exchange bias at first increases then decreases with increasing concentration of dilution at the same temperature. Besides , the maximum of the exchange bias occurs at lower concentration for higher temperature. These are consistent with the results of *Phys. Rev. Lett.* **96** 117204 (2006). The cause of these results is that the spin distribution and the magnetic domain structure change greatly when varying dilute concentration. The exchange bias is maximal when the positive and the negative magnetic domains form a connected network. In addition , at the same concentration of dilution , by comparing the results of the random and regular dilution , we find that the exchange bias are more strongly increased by regular dilution than by random dilution for the FM/AFM bilayers , which shows further that the characteristic of exchange bias in FM/AFM bilayers depends on the interface spin-microstructure.

Keywords : Monte-Carlo method , random doping , regular doping , exchange bias and coercivity

PACC : 7570C , 7560E , 7530H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10347118) and the Natural Science Foundation of College of Jiangsu Province , China (Grant No. 2006KJB140133).

[†] E-mail : hujgyz@263.net