

W(110)基底上的铁纳米岛初始自发磁化态的微磁学模拟

杨秀会[†]

(玉林师范学院物理与信息科学系, 玉林 537000)

(2008 年 8 月 5 日收到, 2008 年 9 月 5 日收到修改稿)

用微磁学模拟研究 W(110)基底上铁纳米岛的初始自发磁化态的磁畴结构, 确定了不规则形状、椭圆形和矩形岛中不同磁畴态之间的各向异性常数的临界点, 得到了纳米岛的磁化态作为各向异性常数和厚度函数的完整相图. 相图中存在一较宽的过渡区, 把双畴态与涡旋态和菱形态分开, 过渡区两侧的边界是不确定的. 计算结果表明, 初始自发磁化态的磁畴结构主要由各向异性及岛的厚度决定, 而且岛的边沿形状对涡旋态和菱形态的磁畴结构有重要影响. 准确的铁纳米岛的各向异性常数仍有待于进一步确定.

关键词: 初始自发磁化磁畴结构, 铁纳米岛, 微磁学模拟, 各向异性

PACC: 7550B, 7560C, 7540M

1. 引言

纳米磁体的一个重要的应用方面是高密度的数据存储. 近年人们提出利用具有单畴或涡旋态的纳米磁体作为高密度磁存储介质的存储单元, 并通过实验和理论研究了许多纳米磁体的磁性, 特别是磁畴结构和磁化强度的反转机理. 自旋极化扫描隧道显微镜 (SP-STM) 是研究纳米磁体的有力工具, 它的空间分辨率达原子尺度. Wiesendanger 等用 SP-STM 观测了涡旋磁畴核心内部的自旋结构^[1]. 最近有的学者还提出轨道存储器 (racetrack memory)^[2,3], 利用纳米带中的磁畴壁作为存储单元. 随着研究的深入和发展, 纳米磁体新的应用方面不断被提出和发现. 例如, 在自旋极化直流作用下以微波频率作高度相干稳定振动的涡旋畴^[4]对于纳米尺寸的微波振荡器和复杂的信号处理有潜在的应用. 由于在纳米存储器件中可利用单畴的磁化强度方向或涡旋畴的磁化强度旋转方向来存储单比特的信息, 研究纳米磁体中单畴和涡旋畴存在的条件及磁畴的反转过程或反转磁场对于实际的应用是非常重要的. 实验^[5-12]和理论^[13,14]表明, 纳米磁体的磁畴结构取决于纳米磁体的形状、横向尺寸和厚度. 如果相邻纳米点的距离

过小, 由于静磁相互作用, 纳米点中的磁畴结构和磁化强度的反转过程将受到明显的影响^[15-17]. 实验^[7,9,11]和微磁学模拟^[9,13,14]得到了一些纳米磁体 (岛和链) 的相图, 这些相图揭示了单畴态或高剩磁态和涡旋态对纳米磁体的横向尺寸和厚度的依赖关系. 一些实验则表明, 铁纳米圆盘^[6,10]或薄膜^[18]各向异性的强度和方向取决于圆盘或薄膜的厚度. 在文献 [5] 中通过自旋极化扫描隧道谱 (SP-STS) 研究 W(110)基底上厚度分别为 3.5, 4.5, 7.5 和 8.5 nm 的铁纳米岛初始自发磁化的磁畴结构, 分别在不同厚度的岛中观测到单畴态、双畴态、涡旋态和菱形态. 从文献 [5] 的实验结果可以推断, 对于横向尺寸和形状相同的纳米岛, 不同的厚度一般具有不同的磁畴结构, 较薄的纳米岛容易形成单畴态或双畴态, 较厚的纳米岛则容易形成涡旋态或菱形态. 由于单畴态或双畴态需要很强的各向异性场来支持 (特别是横向尺寸较大的情况, 如文献 [5]), 而涡旋态或菱形态对应的各向异性则较弱, 因此可以认为, 纳米岛各向异性的强度和厚度有关. 纳米岛中稳定的磁畴结构所对应的总能量在所有可能的磁畴结构中是最底的. 无外磁场时, 总能量由退磁能、交换能和各向异性组成. 根据连续的铁磁性理论可知, 某一磁畴结构的总能量不仅取决于磁性参数, 而且取决于横向

[†] E-mail: xiuhuiyang@126.com

尺寸、厚度和岛的边沿形状. 因此, 纳米岛的磁畴结构取决于磁性参数(特别是各向异性的强度)、横向尺寸、厚度和岛的边沿形状. 纳米岛的磁畴结构对磁性参数和几何参数的依赖关系是相当复杂的, 往往需要通过数值模拟进行确定, 尤其是复杂的几何形状和磁畴结构的情况. 文献 [5] 对实验中铁纳米岛的磁畴结构作了微磁学模拟, 单畴态和涡旋态的模拟结果和实验一致, 但双畴态和菱形态与实验有较大的差别. 正如在文献中所提到的那样, 这种差别是由于所用的各向异性常数的大小引起的. 由于实验上没有确定生长在 $W(110)$ 基底上厚度在 3.5 nm 至 8.5 nm 之间的铁纳米岛的各向异性常数, 研究这个厚度范围内铁纳米岛的磁畴态对各向异性常数的依赖关系是很有必要的.

本文用微磁学程序 OOMMF^[19] 确定文献 [5] 中四种厚度的铁纳米岛初始自发磁化态之间各向异性常数的临界值. 对于具有与文献 [5] 中厚度为 7.5 nm 的纳米岛相同的横向尺寸及形状的纳米岛, 我们通过计算得到了磁畴态与各向异性常数及厚度关系的相图. 我们还计算椭圆形及矩形纳米岛中磁畴态之间各向异性常数的临界值, 研究了岛的边沿形状对磁畴结构的影响.

2. 无外磁场时铁磁体磁畴的微磁学模拟

无外磁场时铁磁体的总能量可写为^[20]

$$E_{\text{tot}} = \int A(\text{grad } \mathbf{m})^2 dV + \int K_u \sin^2 \theta dV - \frac{1}{2} \int \mathbf{H}_d \cdot \mathbf{J} dV, \quad (1)$$

其中第一项为交换能, 第二项为单轴各向异性能, 第三项为静磁能. A 表示交换常数, K_u 表示各向异性常数, θ 为磁化强度 \mathbf{J} 的方向与各向异性轴的夹角. \mathbf{H}_d 为退磁场. $\mathbf{m} = \mathbf{J}/J_s$ 为归一化的磁化强度, 即 $m^2 = 1$. J_s 为饱和磁化强度. 积分遍及整个铁磁体. 程序通过对 Landau-Lifshitz 方程^[21]

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = -|\bar{\gamma}| \mathbf{J} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{|\bar{\gamma}| \alpha}{J_s} \mathbf{J} \times (\mathbf{J} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}), \quad (2)$$

积分, 使一个磁化态弛豫到另一个能量较低的状态. (2) 式中的 \mathbf{J} 为磁化强度, \mathbf{H}_{eff} 为有效场, $\bar{\gamma}$ 为 Landau-Lifshitz 回旋磁比率, α 为阻尼系数.

原则上, 程序 OOMMF 无法模拟热激发导致的初始自发磁化态的形成过程. 由于在每一个磁化态

周围有许多能量较高的状态, 从某一磁化态出发经过弛豫所到达的终态往往不是能量最低的状态, 因为磁化态在变化过程中无法越过许多势垒. 为了找到接近最低能量的磁畴态, 需要对尽可能多的磁化态进行弛豫, 然后把弛豫后磁化态的能量作比较, 得到对应最低能量的状态. 实际上这受到很大的限制. 考虑到实验中的初始自发磁化态是能量最低的稳定态, 我们可以从比较接近实验的磁化态出发进行弛豫, 由此所导致的误差应该是很小的. 对这个问题, 在第 4 节的最后还要作进一步的讨论.

由于文献 [5] 中的纳米岛相互隔开较远, 它们之间的静磁作用可以忽略, 纳米岛可看作是孤立的, 因此可对单个纳米岛进行模拟.

在文献 [5] 中有四种磁畴态, 分别是单畴态、双畴态、涡旋态和菱形态. 对于一个给定的纳米岛和相同的磁性参数, 我们的计算从这四种磁畴态出发, 进行弛豫, 并在达到稳定态时对铁纳米岛的能量进行比较. 具有最低总能量的磁畴对应于稳定的磁化分布, 即能量最低的磁畴态才能在实际中存在.

第一性原理计算^[22]表明, 生长在 $W(110)$ 基底上的双原子层铁薄膜中原子的平均磁矩为 $2.55 \mu_B$, 比块体铁的大 ($2.2 \mu_B$). 据此我们假设, 在厚度低于 8.5 nm 的超薄铁纳米岛中, 饱和磁化强度比块体铁的稍大. 本文把饱和磁化强度取为 $M_s = 2000 \times 10^3 \text{ A/m}$ (大约对应于 $2.55 \mu_B$). 因为 $W(110)$ 基底的晶格常数比块体铁的大, 生长在它上面的铁纳米岛中相邻原子之间的距离应该比块体铁的大. 另外, 位于纳米岛表面的原子缺少一些最近邻原子. 因此铁纳米岛的交换常数应比块体铁的小, 这里取为 $A = 10 \times 10^{-12} \text{ J/m}$, 约为块体铁交换常数的下限值^[23]. 各向异性轴的方向取为 $[1\bar{1}0]$, 各向异性常数取各种不同的值, 以确定各种厚度的纳米岛中形成四种磁畴态的条件. 厚度为 3.5, 4.5, 7.5 和 8.5 nm 的铁纳米岛的横向尺寸(指在纳米岛所在平面内与纳米岛的边沿相切、大致沿岛纵向的矩形的长和宽)分别为 $660.8 \text{ nm} \times 330.4 \text{ nm}$, $648 \text{ nm} \times 300 \text{ nm}$, $433.3 \text{ nm} \times 239.4 \text{ nm}$ 和 $610.5 \text{ nm} \times 331.5 \text{ nm}$. 计算网格的大小在纳米岛所在的平面取为 $2 \text{ nm} \times 2 \text{ nm}$, 进一步减小网格几乎不影响计算结果. 在垂直于纳米岛平面的方向上, 计算网格大小的选取是无关紧要的, 可取为厚度的值, 因为磁化强度与这个方向的坐标无关^[20]. 上述的微磁学参数和四个纳米岛的尺寸分别总结于表 1 和表 2.

表 1 本文的计算所用的微磁学参数(h 表示厚度)

饱和磁化强度 M_s (A/m)	交换常数 A (J/m)	各向异性轴	网格大小
2000×10^3	10×10^{-12}	$[\bar{1}\bar{1}0]$	$2\text{nm} \times 2\text{nm} \times h$

表 2 纳米岛的尺寸

厚度/nm	3.5	4.5	7.5	8.5
横向尺寸/nm \times nm	660.8×330.4	648×300	433.3×239.4	610.5×331.5

给定输入量(横向尺寸、厚度、计算网格大小、交换常数、各向异性常数、饱和磁化强度和磁化分布),让程序弛豫,直到满足收敛条件为止.这时可得终态的磁化强度分布(磁化强度的矢量图)及所对应的能量(总能量、各向异性能和退磁能),然后根据总能量的高低确定能实际存在的稳定磁畴态.

3. 纳米岛的四种磁畴态对单轴各向异性强度的依赖关系

通过计算四种厚度的不规则形状铁纳米岛中四种磁畴态的总能量,我们得到了每个纳米岛的磁畴态与各向异性常数关系的相图.图 1 为本文对四种磁畴图像的模拟结果,由后面的计算结果可知,每个磁畴图像所对应的各向异性常数的值分别在各个磁畴态所对应的范围内.可见模拟得到的磁畴结构与实验是相符的.我们的计算数据表明,对于同一个纳米岛和相同的各向异性常数,单畴态的交换能和各向异性能比双畴态的都小,而单畴态的退磁能则比双畴态的大.菱形态的各向异性能和退磁能比涡旋态的都小,而菱形态的交换能则比涡旋态的大.这里用 ΔE_{KA} 表示双畴态的交换能和各向异性能的总和

与单畴态之差,以及菱形态的交换能和各向异性能的总和与涡旋态之差.用 ΔE_d 表示单畴态的退磁能与双畴态之差,以及涡旋态的退磁能与菱形态之差.

本文计算的图 1 中四种厚度的不规则形状纳米岛的总能量密度随各向异性常数的变化分别如图 2—5 所示.图中已经取理想单畴态的能量密度为纵坐标轴的零点.图 2 是厚度为 3.5 nm 的纳米岛的结果.在 $0-40 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$ 的各向异性常数范围内,涡旋态的总能量比菱形态低,或 ΔE_{KA} 比 ΔE_d 大,当从涡旋态过渡到菱形态时,降低的各向异性能和退磁能补偿不了增加的交换能,表明形成涡旋态.在 $125 \times 10^3-145 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$ 的各向异性常数范围内,双畴态的总能量比单畴态低,或 ΔE_{KA} 比 ΔE_d 小,从单畴态过渡到双畴态时,增加的交换能和各向异性能得到降低的退磁能的补偿,表明形成双畴态.而在各向异性常数超过 $146 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$ 的范围内,单畴态的总能量比双畴态低,或 ΔE_{KA} 比 ΔE_d 大,从单畴态过渡到双畴态时,降低的退磁能补偿不了增加的交换能和各向异性能,因此形成单畴态.单畴态和双畴态的各向异性常数的临界值约为 $145.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$.

图 3 是厚度为 4.5 nm 的纳米岛的结果.在 0—

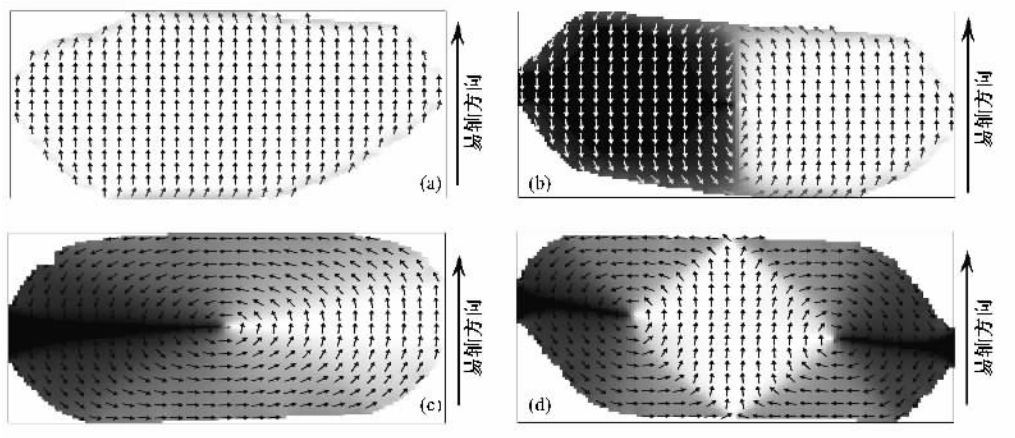


图 1 铁纳米岛磁畴结构的模拟图像 (a) 岛的厚度 $h = 3.5 \text{ nm}$, $K_u = 220 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 单畴 (b) 岛的厚度 $h = 4.5 \text{ nm}$, $K_u = 210 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 双畴 (c) 岛的厚度 $h = 7.5 \text{ nm}$, $K_u = 30 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 涡旋畴 (d) 岛的厚度 $h = 8.5 \text{ nm}$, $K_u = 20 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 菱形态

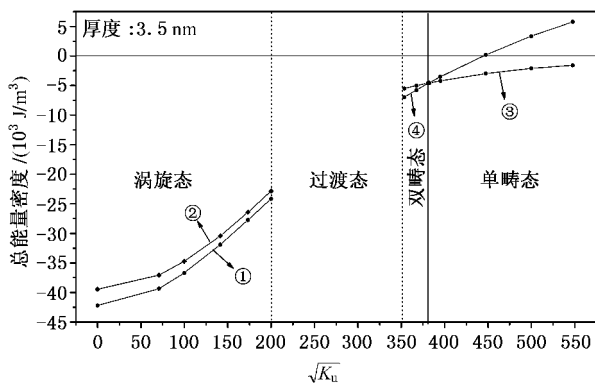


图2 厚度为 3.5 nm 的岛中磁畴态的总能量密度随各向异性常数平方根 $\sqrt{K_u}$ 的变化 (①为涡旋态, ②为菱形态, ③为单畴态, ④为双畴态)

$50 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$ 的各向异性常数范围内, 菱形态的总能量比涡旋态低, 或 ΔE_{KA} 比 ΔE_d 小, 当从涡旋态过渡到菱形态时, 增加的交换能得到降低的各向异性能和退磁能的补偿, 因此形成菱形态. 这种情况与图 2 相反. 根据前面的分析可知, 图 3 的右边与图 2 相似, 只是单畴态和双畴态各向异性常数的临界值大约为 $224.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 比图 2 中的大得多. 应当指出, 在本文的模拟中所得到的双畴态磁畴壁像很窄的扁平涡旋(如图 1(b)), 它们的能量比标准的 Néel 壁低. 这种类型的畴壁实验上还未观测过.

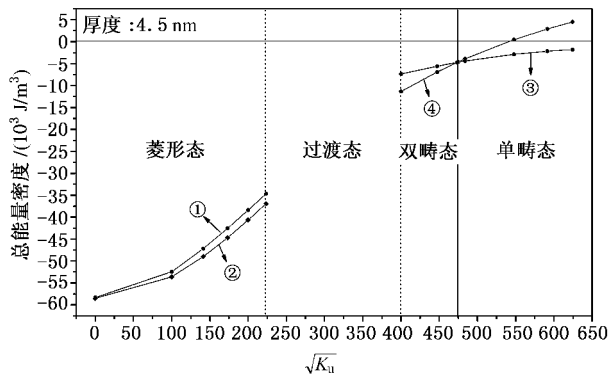


图3 厚度为 4.5 nm 的岛中磁畴态的总能量密度随各向异性常数平方根 $\sqrt{K_u}$ 的变化 (①为涡旋态, ②为菱形态, ③为单畴态, ④为双畴态)

图 4 是厚度为 7.5 nm 的纳米岛的结果. 涡旋态和菱形态各向异性常数的临界值约为 $36.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 单畴态和双畴态的各向异性常数的临界值约为 $476.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$. 模拟表明涡旋中心的磁化强度指向岛平面外, 和实验^[1]的观测结果相符.

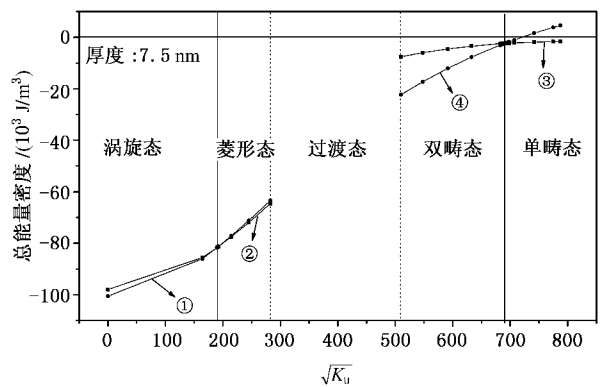


图4 厚度为 7.5 nm 的岛中磁畴态的总能量密度随各向异性常数平方根 $\sqrt{K_u}$ 的变化 (①为涡旋态, ②为菱形态, ③为单畴态, ④为双畴态)

图 5 是厚度为 8.5 nm 的纳米岛的结果. 与图 4 相比, 涡旋态和菱形态的各向异性常数的临界值大约减小到 $8.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$, 单畴态和双畴态的各向异性常数的临界值大约为 $490.5 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$. 可见, 图 4 和图 5 中单畴态和双畴态各向异性常数的临界值比图 2 和图 3 的大得多. 这是由于岛越厚, 形成单畴态时的退磁场越强, 需要更强的各向异性场来支撑.

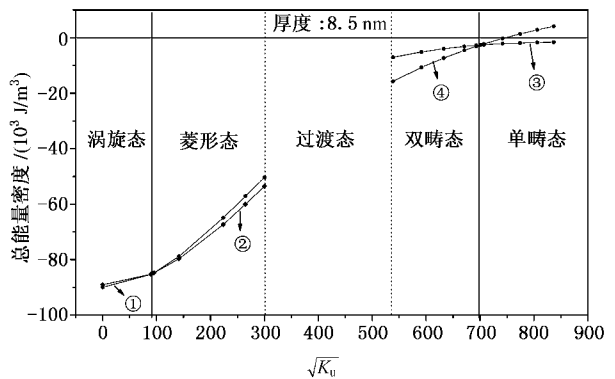


图5 厚度为 8.5 nm 的岛中磁畴态的总能量密度随各向异性常数平方根 $\sqrt{K_u}$ 的变化 (①为涡旋态, ②为菱形态, ③为单畴态, ④为双畴态)

应该指出, 在图 2—5 中只是确定了各向异性常数的临界值. 如果把各向异性常数增加到足够大的值, 涡旋态磁畴和菱形态磁畴都会变形而到达过渡区. 同样, 当把各向异性常数减小到一定的值时, 双畴态磁畴会变形而到达过渡区. 在本文所研究的铁纳米岛中, 过渡态是这样的磁化状态, 它们处于涡旋态和双畴态之间, 或处于菱形态和三畴态之间, 其中的涡旋是变形的, 即与涡旋态和菱形态相比变扁了,

但又比双畴态和三畴态的磁畴壁宽得多. 边沿附近的磁化强度仍主要偏向边沿的方向, 在岛的中部, 涡旋两旁有部分磁化强度指向易轴方向, 类似磁畴. 这两种类型过渡态的磁化分布如图 6 所示. 当然过渡区两旁的分界线是不确定的, 可以有较大的变动范围. 因为当各向异性常数变化时, 一个磁畴态什么时候开始变形是很难准确确定的, 而且对于一个磁畴态怎样才算变形并没有统一的标准, 或者说没有统一的标准定义一个磁畴态, 尤其是对于不规则形状纳米岛的情况. 另外, 单畴态各向异性常数的最大值

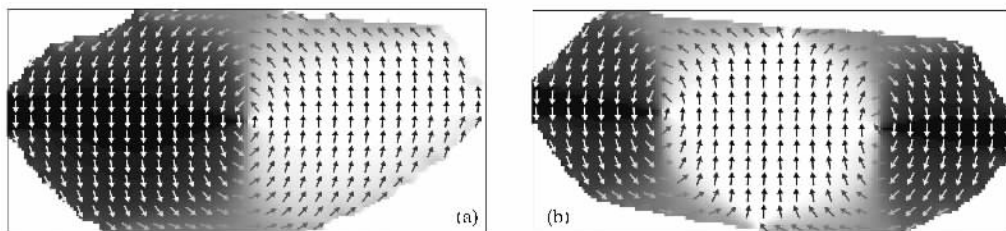


图 6 (a) 双畴态与涡旋态之间的过渡态 (b) 三畴态与菱形态之间的过渡态

也是不确定的, 因为各向异性常数越大, 越有利于单畴态的形成. 可以注意到, 这里的单畴态不是理想的单畴态(只有退磁能而交换能和各向异性能为零的状态), 在岛的边沿附近磁化强度偏离易轴的方向, 导致出现交换能和各向异性能, 但由于退磁能降低, 与理想单畴态相比, 总能量还是减小的. 当各向异性常数增大时, 总能量的减小量逐渐变小, 因此单畴态的总能量随各向异性常数的增大而增大, 单畴态的能量密度逐渐接近理想单畴态的能量密度即纵坐标的零点, 如图 2—5 所示.

图 2—5 中相图的计算结果不依赖于微磁学格子的大小, 因为我们所取的计算格子已足够使结果收敛. 现在讨论饱和磁化强度和交换常数对前面计算结果的影响. 当饱和磁化强度一定时, 增大交换常数, 涡旋态和菱形态之间的各向异性常数的临界值将变大, 这是因为涡旋态和菱形态交换能之差变大, 需要增大各向异性常数, 以使菱形态的各向异性能减小, 从而使菱形态的总能量低于涡旋态. 单畴态和双畴态之间各向异性常数的临界值将变小, 这是因为单畴态和双畴态交换能之差也变大, 需要减小各向异性常数, 以使双畴态的各向异性能减小, 从而使双畴态的总能量低于单畴态. 但交换常数若过大, 四个纳米岛的磁畴态都将没有相界点, 即只存在于涡旋态或单畴态, 这对于图 3 和图 5 而言是与实验结果不符的. 当交换常数一定时, 减小饱和磁化强度, 涡旋态和菱形态退磁能之差及单畴态和双畴态退磁能之差都将变小. 根据类似的分析可知, 临界点的变化趋势也是一样的. 因此, 饱和磁化强度不能过小. 当减小交换常数或增大饱和磁化强度时, 临界点朝相反方向改变. 若交换常数过小或饱和磁化强度过大, 涡旋态和菱形态之间的相界点将为零, 即只存在于菱形态, 这对于图 4 而言是与实验结果不符的. 而且这两个磁性参数也不应与块体铁的值相差过大. 因此, 我们在计算中所用的交换常数和饱和磁化强度的值应该在合理的范围之内.

4. 磁畴相图及岛的边沿形状对磁畴态的影响

由于在图 2—5 中只计算四种厚度纳米岛的数据, 而且岛的横向尺寸和边沿形状各不相同, 各个磁畴态所对应的各向异性常数的范围及磁畴态之间的临界点随厚度的变化规律并不明显. 为了得到作为各向异性常数和厚度函数的完整相图, 我们选取与实验中 7.5 nm 厚的纳米岛有相同形状和横向尺寸的纳米岛进行计算, 结果画于图 7. 厚度的变化范围在 3.5 nm 至 8.5 nm 之间, 两个相邻数据点的厚度值相差 0.5 nm. 在双畴态与涡旋态及菱形态之间有一较宽的过渡区. 和图 2—5 的情况类似, 分开两相的分界线可精确确定, 但过渡区两侧的边界是不确定的. 同样, 单畴态的最大各向异性常数也是不确定的.

为了了解岛的边沿形状对磁畴结构的影响, 我们还计算具有与不规则形状纳米岛相同的横向尺寸和厚度的椭圆形及矩形纳米岛的总能量, 并把所得磁畴态之间的相界点和前面所计算的不规则形状岛磁畴态之间的相界点也标在图 7, 如散布的点所示, 不规则形状、椭圆形和矩形分别用符号 \triangle 、 \circ 和 \square 表示. 由图可见, 对于相同厚度不同形状的纳米岛, 单畴态和双畴态之间的相界点相当靠近, 并接近相界

线,说明岛的边沿形状对单畴态和双畴态的影响较小.而对于相同厚度不同形状的纳米岛,涡旋态与菱形态的之间的相界点相对地有较大的差别.对于涡旋态与菱形态,厚度为 3.5 nm 的不规则形状和椭圆形岛及厚度为 7.5 nm 的椭圆形岛没有相界点,说明只形成涡旋态.厚度为 4.5 nm 的不规则形状和矩形岛及厚度为 8.5 nm 的矩形岛的相界点为零,说明只形成菱形态.因此岛的边沿形状对涡旋态与菱形态有重要的影响.

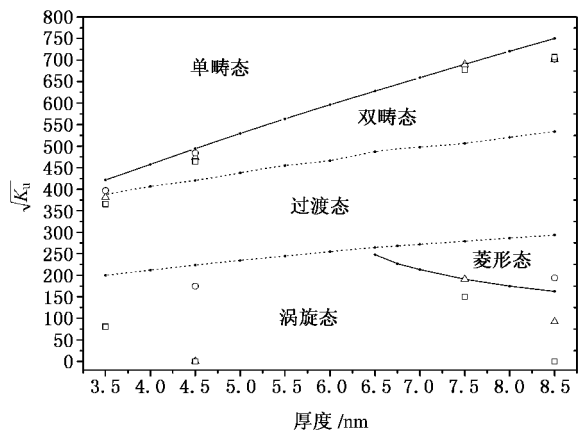


图 7 具有相同横向尺寸和形状的纳米岛磁畴态的完整相图(图中散布的点 \triangle 、 \circ 及 \square 分别表示不规则形状、椭圆形和矩形岛的相界.纵坐标为各向异性常数 K_u 的平方根)

岛的边沿形状对磁畴结构的影响可用退磁场来解释.如果没有各向异性,除磁畴中拐弯处的磁化强度外,退磁场将迫使磁化强度指向平行于岛的边沿方向.如果各向异性很强,大部分磁化强度的方向指向易轴的方向,对于与易轴不平行的边沿部分,接近边沿处的磁化强度由于受到退磁场和各向异性场的共同作用,其方向偏离易轴,各向异性越强,偏离易轴的角度越小.对于平行于易轴的边沿部分,接近边沿处的磁化强度仍指向易轴方向,也就指向边沿方向.如果各向异性较弱,大部分磁化强度的方向仍大致保持与岛的边沿平行.因此,在单畴态和双畴态的情况下,只有边沿附近磁化强度的方向随不同的边沿形状而改变,这种改变对总能量的贡献较小.在涡旋态和菱形态的情况下,当岛的边沿形状改变时,磁畴中几乎所有磁化强度的方向都会随着改变,这种改变对总能量的贡献较大.因此,涡旋态和菱形态受到岛的边沿形状的影响较显著,而单畴态和双畴态受到的影响则较小.

最后讨论第 2 节中所提到的问题.前面已经指出,当各向异性常数很大时,强烈的各向异性场将迫

使磁化强度指向易轴的方向,因而只能形成单畴态或双畴态.但当各向异性很弱时,除了形成涡旋畴和菱形态外,还有没有可能会形成其它的磁畴态?我们对前面几种厚度的不规则岛计算了几种常见磁畴态如文献 [13] 中的 S 态、 C 态和花形 (flower) 态的总能量,发现这些磁畴态的总能量比涡旋态和菱形态高,说明这些磁畴态在实际中不会存在.用矩形岛计算的结果也是类似的.我们还可以用图 2—5 的结果定性地进行推断,除 S 态、 C 态和花形态外的其他非封闭磁畴态在实际中也不会存在.从图中可以看出,涡旋态和菱形态的总能量比理想单畴态低得多,说明从单畴态到涡旋态或菱形态,所降低的退磁能比增加的交换能和各向异性能的总和多得多.理想单畴态的岛没有体磁荷,只有侧面的面磁荷,而封闭畴(涡旋态或菱形态)的岛侧面几乎没有面磁荷,只有体磁荷,由于涡旋态和菱形态的退磁能比理想单畴态低得多,因此封闭畴的体磁荷比理想单畴的面磁荷少得多.当磁化态从理想单畴态变成除封闭畴以外的其他状态时,由于有面磁荷,它们的退磁能虽然比理想单畴态低,但还是比封闭畴高得多,尽管它们的交换能和各向异性能的总和可能比封闭畴低,但如前面所指出的一样,这些磁畴态的总能量还是比封闭畴的高.对于同样的岛,我们还计算了含有三个涡旋的封闭畴的总能量,发现比两个涡旋的封闭畴即菱形态的总能量要高.我们认为这主要是纳米岛不够长或厚度不够大的缘故,并非三涡旋磁畴态一定不能形成.因此在我们的计算中只比较涡旋畴和菱形态总能量的做法是合理的.

5. 结 论

本文通过数值模拟研究了铁纳米岛的初始自发磁化磁畴态与各向异性常数及岛的厚度的关系.得到了实验中四个不规则形状铁纳米岛中不同磁畴态之间的各向异性常数的临界值.对于横向尺寸和形状与实验中 7.5 nm 厚的纳米岛相同的铁纳米岛,得到了磁畴态对各向异性常数和厚度的依赖关系的完整相图.结果表明,纳米岛中的磁畴结构主要由各向异性常数和岛的厚度决定.不规则形状、椭圆形和矩形岛的结果表明,涡旋磁畴和菱形态磁畴明显受岛的边沿形状影响.对于强的各向异性(大约超过 $150 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$),只有单畴态和双畴态能够形成,而对于较弱的各向异性(大约低于 $85 \times 10^3 \text{ Jm}^{-3}$),只能形成

涡旋态和菱形态. 中等强度的各向异性则对应于过渡态. 从实验结果以及单畴态与涡旋态各向异性常数的显著差别可以推断, W(100) 基底上铁纳米岛各向异性的大小主要由岛的厚度决定, 岛越薄, 各向异性越强. 不同厚度铁纳米岛准确的各向异性常数应该可以通过处于外磁场中岛的磁化强度的反转机

理^[6,7,9,12,16] (如反转磁场) 并结合微磁学模拟来确定. 这个问题有待于进一步的研究.

本文作者感谢中国科学院物理所王鼎盛院士对本文的工作给予了许多细致的指导, 并仔细阅读初稿和提出修改意见. 同时感谢刘邦贵研究员给作者介绍 OOMMF 程序并为本文提供部分参考文献.

- [1] Wachowiak A, Wiebe J, Bode M, Pietzsch O, Morgenstern M, Wiesendanger R 2002 *Science* **298** 577
- [2] Parkin S S P, Hayashi M, Thomas L 2008 *Science* **320** 190
- [3] Hayashi M, Thomas L, Moriya R, Rettner C, Parkin S S P 2008 *Science* **320** 209
- [4] Pribiag V S, Krivorotov I N, Fuchs G D, Braganca P M, Ozatay O, Sankey J C, Ralph D C, Buhrman R A 2007 *Nat. Phys.* **3** 498
- [5] Bode M, Wachowiak A, Wiebe J, Kubetzka A, Morgenstern M, Wiesendanger R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **94** 948
- [6] Hanson M, Kazakova O, Blomqvist P, Wäppling R, Nilsson B 2002 *Phys. Rev. B* **66** 144419
- [7] Li S P, Peyrade D, Natali M, Lebib A, Chen Y, Ebels U, Buda L D, Ounadjela K 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1102
- [8] Pulwey R, Zöfl M, Bayreuther G, Weiss D 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 7995
- [9] Cowburn R P, Koltsov D K, Adeyeye A O, Welland M E, Tricker D M 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1042
- [10] Pulwey R, Zöfl M, Bayreuther G, Weiss D 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 7432
- [11] Yamasaki A, Wulfhekel W, Hertel R, Suga S, Kirschner J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 127201
- [12] Zhu X B, Grütter P, Metluskho V, Ilic B 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024423
- [13] Goll D, Schütz G, Kronmüller H 2003 *Phys. Rev. B* **67** 094414
- [14] Jubert P O, Allenspach R 2004 *Phys. Rev. B* **70** 144402
- [15] Shibata J, Shigeto K, Otani Y 2003 *Phys. Rev. B* **67** 224404
- [16] Guslienko K Y, Novosad V, Otani Y, Shima H, Fukamichi K 2001 *Phys. Rev. B* **65** 024414
- [17] Natali M, Prejbeanu I L, Lebib A, Buda L D, Ounadjela K, Chen Y 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 157203
- [18] Thomas O, Shen Q, Schieffer P, Tournerie N, Lépine B 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 017205
- [19] Donahue M J, Porter D G, <http://math.nist.gov/oommf/>
- [20] Hubert A, Schäfer R 1998 *Magnetic Domains* (New York : Springer)
- [21] Donahue M J, Porter D G, OOMMF User 's Guide, Version 1.0, Interagency Report NIST IR 6376, Gaithersburg, MD, 1999
- [22] Qian X, Hübner W 1999 *Phys. Rev. B* **60** 16192
- [23] Robert C, O'Handley 2000 *Modern Magnetic Materials : principles and applications* (New York : JOHN WILEY & SONS, INC)

Micromagnetic simulations of the initial spontaneous magnetic states of nanoscale Fe islands on $W(110)$ substrates

Yang Xiu-Hui[†]

(*Department of Physics and Information Science, Yulin Teachers College, Yulin 537000, China*)

(Received 5 August 2008; revised manuscript received 5 September 2008)

Abstract

The initial spontaneous magnetic domains in nanoscale Fe islands on $W(110)$ substrates are studied numerically with micromagnetic simulations. The critical anisotropies separating different domain states for irregular, elliptic and rectangular shape islands are determined precisely. A full phase diagram of magnetic domain states as a function of anisotropy and thickness is obtained, in which there is a wide transition zone separating two domain states from vortex or diamond domains, and the boundaries on two sides of the transition zone are indefinite. The calculated results indicate that the initial spontaneous magnetic domains are determined mainly by anisotropies and thicknesses, and rim shapes have significant influences on vortex and diamond domain configurations. Further study is needed to determine the exact anisotropies of nanoscale Fe islands.

Keywords : initial spontaneous magnetic domains, nanoscale Fe islands, micromagnetic simulations, anisotropy

PACC : 7550B, 7560C, 7540M

[†] E-mail : xiuhuiyang@126.com