



界面原子扩散对SmCo/Fe交换弹簧双层膜磁性能影响的微磁学研究

何鑫鑫 赵倩

Micromagnetic studies of influence of interface atomic diffusion on magnetic properties of SmCo/Fe exchange-spring bilayers

He Xin-Xin Zhao Qian

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 70, 197502 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210623

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210623>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Fe₃O₄单晶薄膜磁性电场调控的微磁学仿真研究

Electric-field control of magnetic properties of Fe₃O₄ single-crystal film investigated by micro-magnetic simulation

物理学报. 2017, 66(13): 137501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.137501>

核($(\text{Nd}_{0.7}, \text{Ce}_{0.3})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$)—壳($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$)型磁体反磁化的微磁学模拟

Micromagnetic simulations of reversal magnetization in core ($(\text{Nd}_{0.7}, \text{Ce}_{0.3})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$)—shell ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) type

物理学报. 2020, 69(14): 147501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200435>

磁斯格明子的微磁学研究进展和应用

Research progress of micromagnetic magnetic skyrmions and applications

物理学报. 2018, 67(13): 137504 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180165>

界面结构对Cu/Ni多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟

Influence of interface structure on nanoindentation behavior of Cu/Ni multilayer film: Atomic scale simulation

物理学报. 2018, 67(19): 190202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180958>

磁斯格明子拓扑特性及其动力学微磁学模拟研究进展

Research progress on topological properties and micro-magnetic simulation study in dynamics of magnetic skyrmions

物理学报. 2018, 67(13): 137506 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180235>

自由流体层与多孔介质层界面的盐指现象的统一域法模拟

Numerical study on salt finger at interface between fluid layer and porous layer by single-domain approach

物理学报. 2020, 69(21): 214701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200351>

界面原子扩散对 SmCo/Fe 交换弹簧双层膜磁性能影响的微磁学研究*

何鑫鑫 赵倩[†]

(内蒙古科技大学理学院, 包头 014010)

(2021 年 4 月 2 日收到; 2021 年 5 月 23 日收到修改稿)

本文通过三维微磁学数值模拟, 研究了界面处原子扩散形成的界面层对易轴平行和垂直膜面取向 SmCo/Fe 双层膜磁性能的影响。当易轴取向平行膜面时, 体系成核在第二象限。随着界面层厚度的增加, 尽管剩磁逐渐减小, 而成核场和钉扎场逐渐增加, 以致最大磁能积先增加后减小, 直至体系由交换弹簧磁体过渡到刚性磁体。当易轴取向垂直膜面时, 随着界面层厚度的增加, 体系成核由第一象限逐渐过渡到第二象限, 虽然钉扎场从减小、不变到略有增加, 但成核场和剩磁逐渐增加, 导致最大磁能积逐渐增加。在退磁过程中, 膜面内自旋偏转: 易轴平行膜面取向系统显示了 flower 态和 C 态的产生与消失的过程; 而易轴垂直膜面取向系统显示了 vortex 态的产生与消失的过程。随着易轴平行膜面 SmCo/Fe 双层膜界面层中 SmCo 原子扩散比例的增加, 成核场和钉扎场增加但剩磁减小, 最大磁能积先增加后降低。当易轴两种取向时, 对任一界面层厚度, 成核场随界面交换耦合常数的增大而增大, 这表明界面层的存在增强了硬磁/软磁层之间的交换耦合作用。本文建立的模型很好地模拟了相关的实验结果 [2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 072509].

关键词: 微磁学数值模拟, 界面层, 成核场, 磁能积

PACS: 75.70.Cn, 75.40.Mg, 75.30.Gw

DOI: 10.7498/aps.70.20210623

1 引言

Kneller 和 Hawing^[1]于 1991 年提出了硬磁/软磁交换弹簧磁性材料的概念, 该材料通过纳米尺度的交换耦合结合了硬磁相的高矫顽力和软磁相的高饱和磁化强度, 因而比传统的永磁体具有更大的磁能积^[2–7]。Skomski 和 Coey^[8]在 1993 年从理论上预测了硬磁/软磁交换弹簧多层膜的磁能积可达到 120 MGoe。在随后的二十多年, 为了实现如此大的磁能积, 这类交换弹簧磁性材料得到了广泛的研究^[9–16]。Sm-Co 由于具有较高的居里温度, 以其为硬磁相的交换弹簧材料已成为研究热点, 其中, 许多实验^[17–21]和理论^[22–25]研究了 SmCo/Fe 体

系的磁性能。

实验发现, 对薄膜进行退火处理或在高温环境下沉积薄膜会导致 SmCo/Fe 双层膜中界面原子扩散形成梯度界面^[26–29], 这种梯度界面会导致薄膜的成核场增大, 以致其磁能积增大。Choi 等^[30]在 SmCo/Fe 双层膜的软磁层一侧添加由 0.2 nm SmCo 和 0.2 nm Fe 交替排列的人工混合层来代替梯度界面, 实验表明, 这种混合层同样可以提高硬磁/软磁层之间的交换耦合作用, 从而引起成核场和最大磁能积的增加。我们用一维解析微磁学方法研究了界面原子扩散(在软磁层一侧形成的界面层)对 SmCo/Fe 多层膜体系磁性能的影响^[31], 也得到了界面层的存在和其厚度的增加会导致多层膜的成核场增加以致最大磁能积增大。四川师范大

* 国家自然科学基金(批准号: 51861030)和内蒙古自治区自然科学基金(批准号: 2019MS01002)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: zhaoqianqm@163.com

学 Si 等^[32] 基于三维数值模拟计算研究了界面原子相互扩散对 Nd₂Fe₁₄B/Fe 双层膜磁性能的影响.

上述情况表明, 在 SmCo/Fe 交换耦合弹簧体系中, 适当的界面层可以增强软磁/硬磁之间的交换耦合作用, 从而提高双层膜体系的磁性能. 因此, 界面层对这种体系磁性能的影响就成为一个有意义的研究课题. 不过, 到目前为止, 关于这一课题的理论研究都是利用一维解析微磁学方法^[31], 未见利用三维微磁学模拟方法研究的报道. 三维微磁计算^[31,32]不但可以给出磁滞回线中的成核场、矫顽力和磁能积等物理量, 还可以计算膜面内的自旋分布, 并能提供杂散场对磁性能的影响. 本文运用三维数值模拟软件 (OOMMF) 着重从自旋的空间分布研究了界面原子扩散(界面层分布在软磁层一侧) 对易轴平行和垂直膜面取向 SmCo/Fe 双层膜退磁曲线和磁能积的影响, 得到了与实验结果一致且更为丰富 的结果.

2 计算模型与方法

本文采用的模型是硬磁/软磁双层膜体系, 如图 1 所示. 取硬磁/软磁双层膜体系界面的中心为坐标原点, 建立 *o-xyz* 坐标系, *z* 轴假设垂直于膜面. 图 1(a) 和图 1(b) 分别显示的是易轴 *e* 和外加磁场 *H* 的方向平行 *x* 轴和 *z* 轴. 图 1 中变量 *t* 定义为每层的厚度, 上角标 *s*, *h* 和 *i* 分别代表软磁层、硬磁层和界面层. *t^s* 和 *t^h* 分别是界面原子没有扩散时软磁层和硬磁层的厚度, 图中的 *z* = 0 平面是硬磁层与软磁层之间的界面. 为了与实验结果^[30] 相比较, 本文中的计算模型是硬磁相中界面附近的原子扩散到软磁相, 即界面层存在于原软磁相一侧.

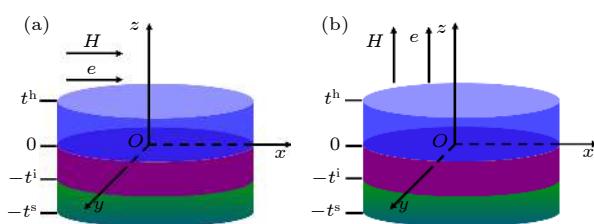


图 1 本文基本方案为 $t^s + t^i + t^h = 15$ nm, 计算范围从 $-t^s$ 到 t^h . 计算模型 (a) 易轴平行膜面; (b) 易轴垂直膜面

Fig. 1. The basic scheme in our work, with regions calculated from $-t^s$ to t^h when $t^s + t^i + t^h = 15$ nm. Fig. 1(a) and (b) show the model for the calculation of the easy axis parallel and perpendicular to the film plane, respectively.

从 $-t^s$ 到 $-t^i$ 、从 $-t^i$ 到 0 和从 0 到 t^h 分别对应软磁层、界面层和硬磁层.

三维微磁学数值模拟软件 OOMMF^[33] (object oriented micromagnetic framework) 的计算是基于 Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 动力学方程^[33–38]:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -|\gamma| \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_S} \left(\mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right), \quad (1)$$

其中 \mathbf{M} , \mathbf{H}_{eff} 和 γ 分别是磁化强度、有效场和旋磁比; γ 默认为 2.211×10^5 . M_S 是饱和磁化强度, α 是无量纲阻尼系数. 阻尼系数 α 的实验值一般为 0.01—0.1, 但其值并不影响体系的平衡态, 因此模拟中 α 取 0.5 以缩短计算时间, 减少耗能. 有效场被定义为

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\mu_0^{-1} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}}. \quad (2)$$

Brown 方程^[3,8,34] 给出平均能量密度 *E* 是 \mathbf{M} 的函数

$$E = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \left[\frac{\nabla \mathbf{M}}{M_S} \right]^2 - K(\mathbf{r}) \frac{(\mathbf{M} \cdot \mathbf{n})^2}{M_S^2} - \mu_0 \mathbf{M} \cdot \mathbf{H} - \frac{1}{2} \mu_0 \mathbf{H}_d(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{H} 和 $\mathbf{H}_d(\mathbf{r})$ 分别为外磁场和静磁场; \mathbf{n} 是沿易轴 *e* 方向上的单位矢量; *A* 和 *K* 分别为交换常数和磁晶各向异性常数, 等式右边的四项从左往右分别为交换能、磁晶各向异性能、外场能(塞曼能)和静磁能(退磁能).

文中 SmCo 和 Fe 分别作为硬磁相和软磁相. 在 OOMMF 软件模拟计算中, 硬磁层和软磁层的宽度和长度都取 300 nm, 为了实现计算精度和计算时间之间的平衡, 模型被划分为 $3 \text{ nm} \times 3 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ 规格的许多小网格, 网格的宽度接近硬磁材料的布洛赫壁宽度^[39–41]. 此外, 材料的本征参数^[31,32] 为 $A^h = 1.20 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$, $K^h = 5.0 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$, $M_S^h = 5.50 \times 10^2 \text{ emu/cm}^3$, $A^s = 2.50 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$, $K^s = 4.60 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$, $M_S^s = 1.71 \times 10^3 \text{ emu/cm}^3$. 为了简化计算, 界面层参数全用一级近似, 即 $M_S^i = (M_S^h + M_S^s)/2$, $A^i = (A^h + A^s)/2$ 和 $K^i = (K^h + K^s)/2$. 尽管这只是对参考文献^[30] 实验数据的粗略估计, 但计算结果与实验结果定性一致, 此外在参考文献^[31] 和^[32] 中也使用了这种近似方法. 软磁层与界面层及界面层与硬磁层之间的交换耦合常数分别为 $2.175 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$ 和 $1.525 \times 10^{-6} \text{ erg/cm}$.

3 计算结果

3.1 退磁曲线

图 2 给出模拟计算得到的界面层厚度变化时易轴为平行膜面和垂直膜面两种取向下的 SmCo/Fe 双层膜的退磁曲线。图 2(a) 显示了界面层厚度不同时易轴平行取向 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的退磁曲线。体系从正的饱和磁化状态 (磁矩与外磁场的夹角 $\theta = 0^\circ$) 起, 随着外磁场 H 的减小, 当 $H = -H_N$ (H_N 表示成核场) 时, 磁矩开始偏离初始饱和磁化方向, 即在第二象限成核。图 2(a) 右下角的插图给出了成核场 H_N 随界面层厚度 t^i 的变化, 当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 成核场 H_N 分别是 $1.3, 2.7, 5.3, 10.7$ 和 21.3 kOe, 可见成核场随界面层厚度的增加逐渐增大。随着外磁场的进一步降低, 磁矩与外磁场的夹角 θ 迅速增加, 磁化强度迅速减小, 直到 $H = -H_P$ (H_P 定义为钉扎场), 所有的磁矩突然翻转到与外磁场反向的状态 (即 $\theta = 180^\circ$), 即反向饱和磁化状态, 这是一个不可逆过程。图 2(a) 右下角的插图也给出了钉扎场 H_P 随界面层厚度 t^i 的变化, 当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 钉扎场 H_P 分别是 $6.7, 8.7, 10.7, 13.3$ 和 21.3 kOe, 钉扎场随着界面层厚度的增加逐渐增加。随着界面层厚度的增加, 成核场和钉扎场之间的差值逐渐减小, 退磁曲线的方形度逐渐升高。当 $t^i \geq 8$ nm 时成核场和钉扎场相等, 对应的磁滞回线为矩形, 此时体系表现为刚性磁体。此外, 对于所有厚度的界面层, 矫顽力 H_C 都等于钉扎场, 矫顽力机制均为钉扎。

图 2(b) 显示了界面层厚度不同时易轴垂直取向 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的退磁曲线。由退磁曲线得到的 H_N , H_P 与 H_C 随 t^i 的变化在图 2(b) 右下角插图中给出。从插图中可以得出, 当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 成核场 H_N 分别是 $-15.3, -14.0, -11.3, -6.0$ 和 6.7 kOe, 成核场随着界面层厚度的增加而单调增加, 与易轴平行取向的体系定性一致, 但与易轴平行取向体系成核在第二象限不同的是, 垂直取向体系的成核随着界面层厚度的增加从第一象限过渡到了第二象限。当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 钉扎场 H_P 分别是 $16.7, 16.0, 13.3, 13.3$ 和 14.0 kOe, 随着界面层厚度的增加, 钉扎场先减少、不变后增加, 这与易轴平行取

向体系钉扎场随着界面层厚度单调增加不同。当 $t^i = 0$ 和 2 nm 时, 矫顽力 $H_C = 10.6$ 和 13.3 kOe, 矫顽力机制非成核非钉扎; 当 $t^i \geq 4$ nm 时, $H_C = H_P$, 即矫顽力机制为钉扎。以上易轴垂直取向和平行取向在成核、钉扎及矫顽力随界面层厚度变化上的不同, 归咎于垂直取向体系存在退磁场。因成核场和钉扎场的差值随 t^i 逐渐减小, 方形度升高。此外, 与易轴平行取向体系界面层厚度对成核场和钉扎场相差不多不同的是, 垂直取向体系中界面层厚度对成核场的影响明显大于钉扎场。

由界面层参数 $M_S^i = (M_S^h + M_S^s)/2$ 和 $K^i = (K^h + K^s)/2$ 可知, 界面层的饱和磁化强度 M_S^i 和磁晶各向异性常数 K^i 分别小于和大于软磁层的饱和磁化强度 M_S^s 和磁晶各向异性常数 K^s 。因此, 当薄膜厚度不变且界面层位于原软磁层一侧时, 随着界面层厚度 t^i 的增加, 体系的饱和磁化强度 M_S 减小, 矫顽力 H_C 增大, 导致方形度升高。

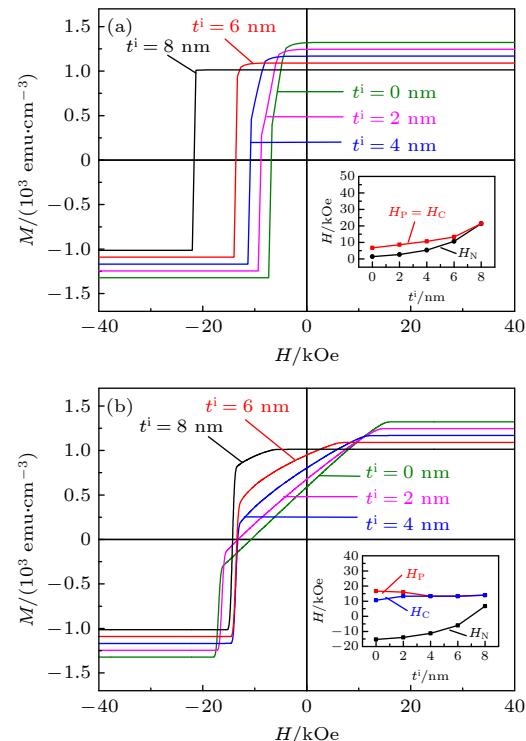


图 2 界面层厚度 t^i 不同时 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的退磁曲线 (a) 易轴平行膜面; (b) 易轴垂直膜面。插图是 H_N , H_P 和 H_C 随 t^i 的变化曲线

Fig. 2. Demagnetization curves of SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) bilayers for various interface layer thicknesses t^i . Fig. 2(a) and 2(b) show the demagnetization curves of the easy axis parallel and perpendicular to the film plane, respectively. The inset shows the change curves of the H_N , H_P and H_C as functions of t^i .

3.2 自旋分布

3.2.1 膜厚方向的自旋分布

磁滞回线宏观地反映了在外磁场作用下磁体的磁化过程,但是微观情况却要通过自旋的分布才能反映出来。膜厚方向的自旋分布可以清晰地显示出退磁过程中磁畴的变化。**图3**给出计算的易轴平行和垂直膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜膜厚方向的自旋分布。从**图3**得到的软磁层表面、软磁层与界面层界面、界面层与硬磁层界面及硬磁层表面的自旋和外磁场的夹角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 随外磁场的变化显示在右上角插图中。

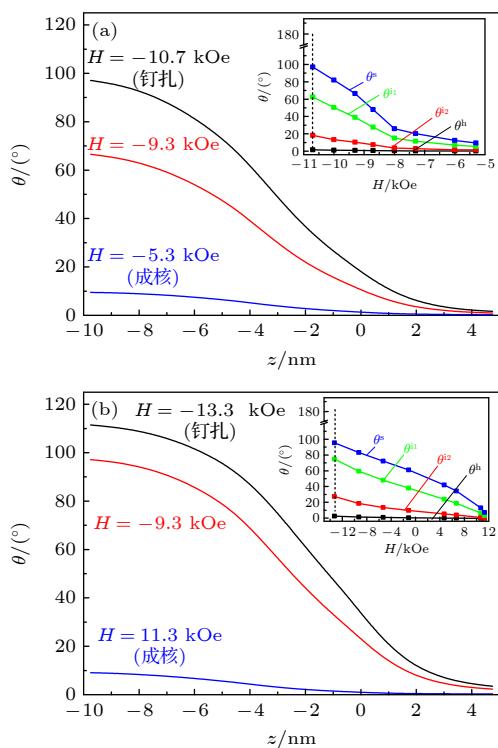


图 3 $t^i = 4$ nm 时 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜在不同外磁场下膜厚方向上的自旋分布 (a) 易轴平行膜面; (b) 易轴垂直膜面。插图是四个关键角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 随外磁场的变化曲线

Fig. 3. Spin distributions in the thickness direction for the SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) bilayer with $t^i = 4$ nm under various applied magnetic fields. Fig. 3(a) and (b) show the spin distributions of the easy axis parallel and perpendicular to the film plane, respectively. The inset shows the evolution of four key angles, i.e., θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} and θ^h as functions of the applied magnetic field.

图3(a)描述了 $t^i = 4$ nm 时易轴平行膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜的自旋角度分布 $\theta(z)$ 随外磁场的变化, 插图给出了四个关键

角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 随外磁场的变化。从**图3(a)**中可以看出, 在成核点 $H = -5.3$ kOe, 体系的自旋从正的饱和磁化状态偏离, 此时, θ^s , θ^{i_1} 和 θ^{i_2} 分别为 9.5° , 5.5° 和 1.5° , 它们大于 $\theta^h (= 0.3^\circ)$, 在硬磁层和软磁层之间形成了 9.2° 锥形磁畴壁。随着外磁场的进一步减小, 锥形磁畴壁迅速长大。当 $H = -9.3$ kOe 时, 长成了成熟的 65.5° 磁畴壁。当钉扎点 $H = -10.7$ kOe 时磁畴壁达到最大, 为 95.4° 。在钉扎之后, 系统经历了不可逆的磁反转过程, 体系处于另外一个自旋取向一致状态, 即负向饱和磁化状态。实际上, 我们计算了不同界面层厚度的对应体系的角度分布, 结果表明界面层厚度对角度 $\theta(z)$ 影响很小, 这与文献 [31] 利用一维微磁学解析计算结果定性一致。

从**图3(a)**右上角插图可以看出, θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 在成核和钉扎之间, 随着外磁场的减小逐渐增加, 在任一个外磁场下依次减小, 可见从软磁层、界面层到硬磁层内的自旋对外磁场的响应依次减弱。此外, θ^s 比 θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 明显地大, 表明是软磁层内的自旋偏转通过交换耦合作用依次带动界面层和硬磁层内的自旋偏转。也就是说, 软磁层和界面层第一个界面处的自旋比界面层和硬磁层第二个界面处的自旋对外磁场响应快。实际上, 我们还计算了不同界面层厚度下体系的以上四个关键角对外磁场的响应, 计算结果表明, 随着界面层厚度的增加, 第一界面处的自旋相比第二界面处的自旋对外磁场的响应更快。

图3(b)给出 $t^i = 4$ nm 时易轴垂直膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜的角度分布, 插图给出了四个关键角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 随外磁场的变化。从图中可以得出, 在外磁场 $H = 11.3$ kOe (成核), $H = -9.3$ kOe 及 $H = -13.3$ kOe (钉扎) 处, 对应的磁畴壁分别为 8.8° , 94.9° 和 107.9° , 磁畴壁的成长规律与易轴平行取向时类似。从插图中得出软磁层、界面层、硬磁层及相邻两个层之间界面的自旋对外磁场的响应规律也与易轴平行取向时类似。与平行取向体系不同的是, 垂直取向体系成核后关键角 θ^s , θ^{i_1} 和 θ^{i_2} 对外磁场的响应较迅速, 即随着外磁场的减小, 它们快速变大, 并且, 随着外磁场的进一步降低, 它们的增长相对变缓, 这与我们利用一维微磁学解析计算 [31] 定性一致。

3.2.2 膜面内的自旋分布

为了充分揭示磁化反转机制, 应讨论不同外磁场下膜面内的自旋分布. 图 4 和图 5 分别显示 $t^i = 4 \text{ nm}$ 时易轴平行与垂直膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜不同外场下四个关键角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 对应膜面内的自旋分布.

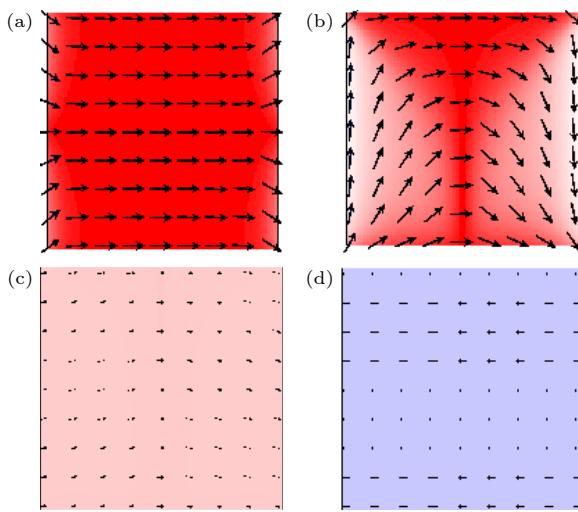


图 4 $t^i = 4 \text{ nm}$ 时易轴平行膜面 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜在不同外磁场下一些膜面内的自旋分布 (a) $H = -5.3 \text{ kOe}$ 时的软磁层表面; (b) $H = -8.7 \text{ kOe}$ 时的软磁层表面; (c) $H = -10.7 \text{ kOe}$ 时的硬磁层与界面层第二界面; (d) $H = -11.3 \text{ kOe}$ 时的硬磁层表面. 显示比例为 1:12, 即图中的每一个磁矩代表 12×12 个计算的磁矩

Fig. 4. The spin distributions within some film planes for the parallel SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) bilayer with $t^i = 4 \text{ nm}$ under various applied magnetic fields: (a) $H = -5.3 \text{ kOe}$, the soft layer surface; (b) $H = -8.7 \text{ kOe}$, the soft layer surface; (c) $H = -10.7 \text{ kOe}$, the second interface between the hard and interface layers; (d) $H = -11.3 \text{ kOe}$, the hard layer surface. The adopted ratio 1:12 for presentation. This means that one displayed magnetic moment at the figure stands for 12×12 calculated moments.

图 4 显示的是易轴平行取向体系在一定外磁场下某些膜面内的自旋分布. 图 4(a) 为成核点 $H = -5.3 \text{ kOe}$ 下的软磁层表面 ($\theta^s = 9.5^\circ$) 自旋分布图, 从图 4(a) 中可以看出, 远离中心且与外磁场方向 (平行膜面且水平向右) 垂直的两侧自旋开始偏转, 此时软磁层与界面层第一界面处的 ($\theta^{i_1} = 5.5^\circ$) 自旋和硬磁层与界面层第二界面处的 ($\theta^{i_2} = 1.5^\circ$) 自旋都也有明显的偏转, 这两个膜面内自旋偏转规律与软磁层表面自旋偏转规律类似, 自旋偏转都呈 flower 态^[38,39]. 然而, 此时硬磁层表面自旋 ($\theta^h = 0.3^\circ$) 几乎不偏转. 图 4(b) 显示 $H = -8.7 \text{ kOe}$ 时软磁层表面 ($\theta^s = 47.9^\circ$) 在与外磁场垂直方向

的中心轴自旋刚刚开始偏转分布图. 从该图中可以看出, 与外磁场方向垂直的两侧自旋偏转角度最大; 与成核点时 (图 4(a)) 对比, 与外磁场平行方向的上半膜面内的磁矩偏转到了与下半膜面内的磁矩方向趋向一致, 此时磁矩与第一界面处的磁矩 ($\theta^{i_1} = 27.6^\circ$) 都呈 C 态^[38,39]. 然而, 直到钉扎点 $H = -10.7 \text{ kOe}$ 时, 硬磁层与界面层第二界面处 ($\theta^{i_2} = 18.3^\circ$) 与磁场方向垂直中心轴自旋仍然没有发生偏转 (图 4(c)), 此时, 硬磁相表面 ($\theta^h = 1.7^\circ$) 自旋仍然没有发生明显偏转, 磁畴壁 (95.4°) 最大. 钉扎后, 体系经历了不可逆翻转, 当 $H = -11.3 \text{ kOe}$ 时, 体系内所有自旋与外磁场方向夹角为 180° . 图 4(d) 显示的是硬磁相表面钉扎后 $H = -11.3 \text{ kOe}$ 的磁矩.

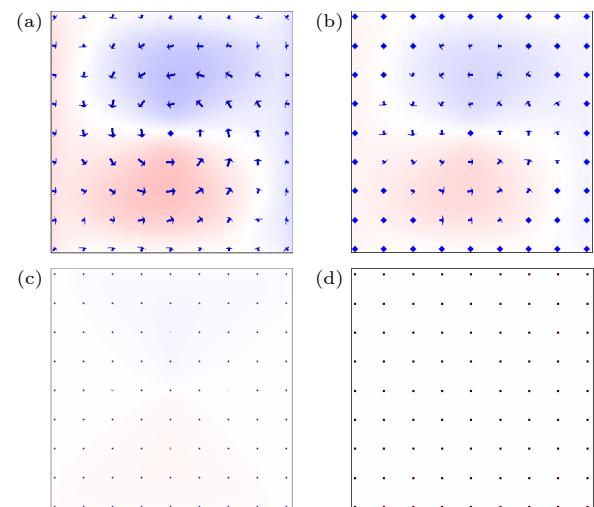


图 5 $t^i = 4 \text{ nm}$ 时易轴垂直膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜不同外磁场下四个关键角对应膜面内的自旋分布 (a) $H = 10.7 \text{ kOe}$ 时的软磁层表面; (b) $H = 10.7 \text{ kOe}$ 时的软磁层与界面层第一界面; (c) $H = 2.7 \text{ kOe}$ 时的硬磁层与界面层第二界面; (d) $H = -14.0 \text{ kOe}$ 时的硬磁层表面. 显示比例为 1:12, 即图中的每一个磁矩代表 12×12 个计算的磁矩

Fig. 5. The spin distributions corresponding to four key angles within the film plane for the perpendicular SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) bilayer with $t^i = 4 \text{ nm}$ under various applied magnetic fields: (a) $H = 10.7 \text{ kOe}$, the soft layer surface; (b) $H = 10.7 \text{ kOe}$, the first interface between the soft and interface layers; (c) $H = 2.7 \text{ kOe}$, the second interface between the hard and interface layers; (d) $H = -14.0 \text{ kOe}$, the hard layer surface. The adopted ratio 1:12 for presentation. This means that one displayed magnetic moment at the figure stands for 12×12 calculated moments.

图 5 显示的是易轴垂直取向体系在四个关键角 θ^s , θ^{i_1} , θ^{i_2} 和 θ^h 对应膜面内的自旋分布. 体系在成核点 $H = 11.3 \text{ kOe}$ 时自旋分布情况是: 只有软

磁层表面自旋 ($\theta^s = 9.1^\circ$) 远离中心处自旋首先开始偏离正的饱和磁化状态, 其余三个膜面内的自旋没有发生偏转. 图 5(a) 和图 5(b) 为成核之后外磁场 $H = 10.7$ kOe 下软磁层表面和软磁层与界面层第一界面处的自旋分布图. 图 5(a) 中, 软磁层表面自旋 ($\theta^s = 15.6^\circ$) 开始呈 vortex 状 [11,22,40,41], 中心处自旋没有发生偏转, 薄膜边缘处自旋偏转角度小于围绕中心处的自旋偏转角度. 软磁层与界面层第一界面处 ($\theta^{i_1} = 8.0^\circ$, 见图 5(b)) 远离中心和薄膜边缘处自旋刚刚首先发生偏转, 其余两个膜面内的自旋没有发生偏转. 进一步降低外磁场, 当 $H = 2.7$ kOe 时, 硬磁层与界面层的第二界面处自旋 ($\theta^{i_2} = 8.3^\circ$) 刚刚开始偏转 (图 5(c)), 此时, 软磁层表面和第一界面处的中心自旋早已远离正饱和磁化状态 (分别在 $H = 6.7$ 和 4.7 kOe 时对应两个膜面内中心自旋开始偏转). 尽管外磁场减小到钉扎点 $H = -13.3$ kOe 时, 硬磁层表面 ($\theta^h = 3.5^\circ$) 自旋仍然没有发生明显偏转, 第二界面处的自旋呈 vortex 状态 (中心自旋仍没有发生偏转), 此时磁畴壁最大 (=107.9°), 体系的可逆翻转结束. 钉扎之后外磁场 $H = -14.0$ kOe 时 (见硬磁相表面磁矩图 5(d)), 体系所有自旋都突变到负饱和磁化状态, 体系自旋开始了不可逆翻转过程.

实际上, 我们计算了所有情况的膜面内自旋分布图, 除了界面层厚度较大且对应磁滞回线为矩形 (体系的成核场等于钉扎场, 成核时体系内所有自旋同时从正饱和磁化状态翻转到负饱和磁化状态) 外. 其他任何界面层厚度下易轴平行取向和易轴垂直取向 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜中自旋的偏转规律与两种取向下的 $t^i = 4$ nm 对应类似.

3.3 磁能积

磁能积是衡量磁性材料性能的重要指标. 根据图 2 中的退磁曲线, 通过公式 $BH = -H(4\pi M + H)$ 可以计算出磁能积 (BH). 图 6(a) 为界面层厚度不同时易轴平行膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的磁能积. 从图中可以得出, 当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 最大磁能积 (BH)_{max} = 47.2, 51.1, 51.6, 46.9 和 40.5 MGoe. 可以看出, 最大磁能积随着界面层厚度的增加先增大后减小. 当 $t^i \leq 4$ nm 时, 磁能积分布在 $H \geq -9.6$ kOe 范围内, 而体系也在此外磁场范围内成核 (如图 2(a)). 因此, 由于界面层厚度的增加, 即使剩磁减小, 但成核场和矫顽力

增加, 导致最大磁能积增大. 然而, 当 $t^i > 4$ nm 时, 磁能积分布在 $H \geq -12.8$ kOe 范围内, 随着界面层厚度的增加, 剩磁减小, 成核场和矫顽力增加, 但是最大磁能积减小. 可见, 成核场对磁能积的影响到界面层厚度较大时消失, 剩磁决定磁能积. 以上理论计算获得最大磁能积随着界面层厚度的增加先增大后减小的定性规律在实验 [27] 中已报道. 实验测量表明, 随着制备易轴平行膜面 SmCo/Fe 双层膜退火温度的升高, 引起 SmCo/Fe 界面原子扩散程度增强, 导致双层膜的矫顽力减小但成核场增加, 磁能积增加; 然而, 在较高的退火温度下, 矫顽力减小到使体系成为类单相, 进而促使磁能积下降.

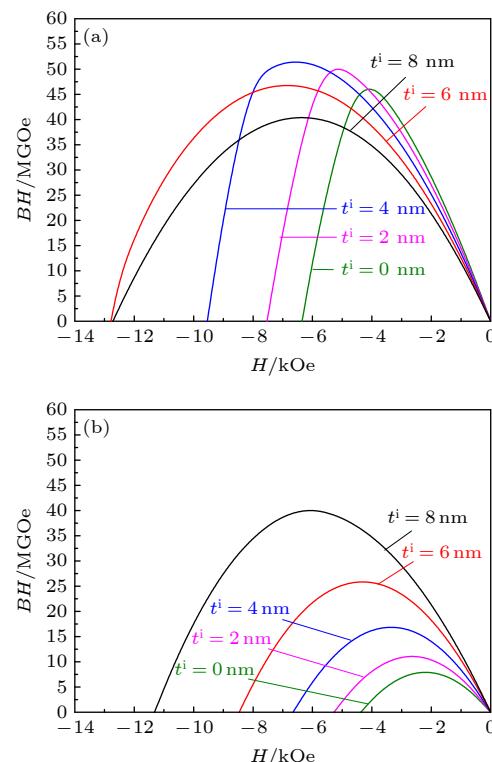


图 6 界面层厚度 t^i 不同时 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的磁能积 (BH) (a) 易轴平行膜面; (b) 易轴垂直膜面
Fig. 6. Energy products (BH) of SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) bilayers for various interface layer thicknesses t^i : (a) and (b) show the energy products of the easy axis parallel and perpendicular to the film plane, respectively.

图 6(b) 为界面层厚度不同时垂直取向 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜的磁能积. 当 $t^i = 0, 2, 4, 6$ 和 8 nm 时, 最大磁能积 (BH)_{max} = 8.1, 11.3, 17.1, 25.9 和 40.2 MGoe, 在体系达到刚性磁体之前, 体系为交换弹簧时, 随着界面层厚度的增加, 因成核场增加剩磁增加, 磁能积增加. 由于矫顽力相差不多, 所以磁能积的增加来源于成核场的大幅

度增加。当 $t^i = 4$ nm 时, 最大磁能积与无界面层时相比增加了大约 1 倍。平行取向情况(如图 5(a)), 当 $t^i = 4$ nm 时, 最大磁能积与无界面层时相比增加了 9.3%。可见, 界面层厚度对最大磁能积的影响在垂直取向的情况下更明显。

4 讨 论

Choi 等^[30]在高温沉积条件下, 在易轴平行膜面取向 SmCo/Fe 双层膜的软磁相 Fe 一侧的界面处添加了由 0.2 nm Fe 和 0.2 nm SmCo 交替组成的人工混合层。实验发现, 随着人工混合层的增加, 成核场增加, 进而导致磁能积增加。三维微磁学模拟和实验的相互比较, 可以使理论计算模型与实验结果互相印证, 进而揭示实验结果内在的物理本质。图 7 比较了平行取向 SmCo(20 nm)/Fe($20 - t^i$ nm) 双层膜的实验结果^[30](见图 7(a)) 和对应图 1(a) 中模型的三维数值模拟计算结果(见图 7(b)) 的磁能积(BH)。考虑 OOMMF 模拟软件计算精度

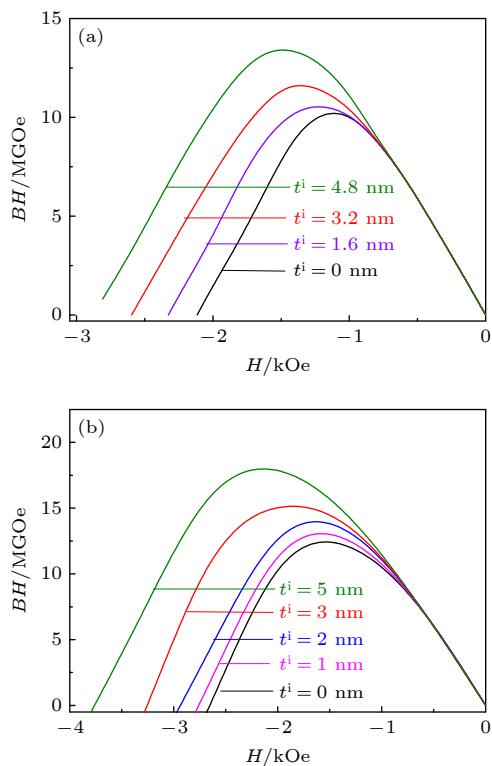


图 7 界面层厚度 t^i 不同时易轴平行膜面 SmCo(20 nm)/Fe($20 - t^i$ nm) 双层膜的磁能积(BH) (a) 实验测量^[30]; (b) 理论计算

Fig. 7. Energy products (BH) in parallel SmCo(20 nm)/Fe($20 - t^i$ nm) bilayers for various interface layer thicknesses t^i : (a) The experimental measurement^[30]; (b) the theoretical calculation.

和计算效率、实验样品结构和成分表征后, 尽管我们理论计算模型中选取的界面层厚度与实验数据并不完全一致, 但是可以说明理论计算结果和实验结果定性一致: 随着界面层(混合层)厚度的增加, 磁能积增加。

以上计算中 SmCo 原子在 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜界面层中的扩散比例为 50%。为了讨论界面层厚度一定时, SmCo 原子在界面层中的扩散比例对体系磁性能的影响, 我们计算了易轴平行膜面 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜 $t^i = 4$ nm 时, SmCo 原子的扩散比例为 10%, 30%, 50%, 70% 和 90% 的磁性能, 计算结果见图 8。从图 8 中可以看出: 在 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜中, 随着 SmCo 原子扩散比例的增加, 成核场和钉扎场(矫顽力机制为钉扎)增加, 但剩磁减小, 导致最大磁能积先增加后减小。

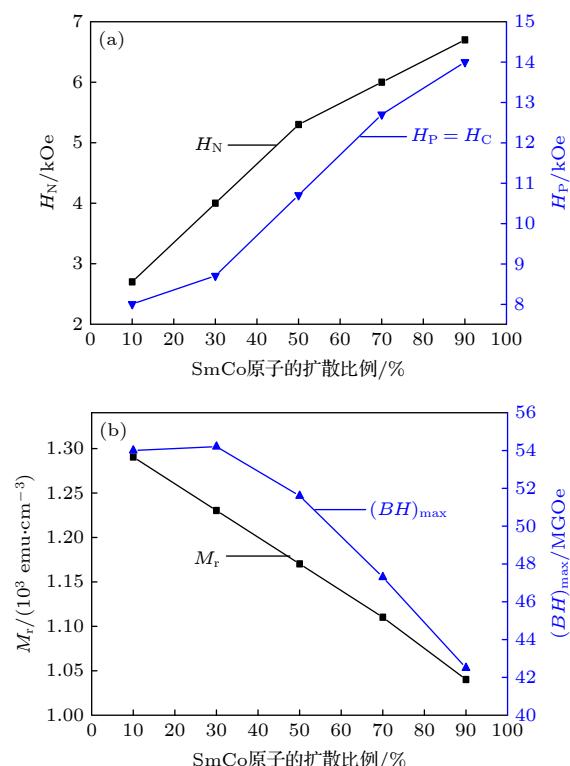


图 8 易轴平行膜面 SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) 双层膜, 当 $t^i = 4$ nm 时 SmCo 原子的扩散比例为 10%, 30%, 50%, 70% 和 90% 的 (a) 成核场 H_N 、钉扎场 H_P 和矫顽力 H_C ; (b) 剩磁 M_r 和最大磁能积 $(BH)_{\max}$

Fig. 8. (a) Calculated nucleation field H_N , pinning field H_P , and coercivity H_C ; (b) remanence M_r and maximum energy product $(BH)_{\max}$ as functions of t^i for parallel SmCo(5 nm)/Fe($10 - t^i$ nm) with $t^i = 4$ nm when the ratio of SmCo atomic diffusion are 10%, 30%, 50%, 70% and 90%, respectively.

为了进一步阐明界面层对硬磁/软磁交换弹簧磁性影响的机理, 图9给出了模拟计算的易轴平行和垂直膜面取向 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜的成核场 H_N 随界面层厚度和界面耦合常数的变化。理论计算表明: 在界面层厚度一定的情况下, 随着界面交换耦合常数的增加, 成核场增加; 在界面耦合常数一定的条件下, 随着界面层厚度的增加, 成核场增加, 这与我们之前的理论计算结果^[31]定性一致。磁反转过程开始于主要在软磁相中磁畴壁的成核, 之后是从软磁相到硬磁相磁畴壁的可逆生长和移动^[42]。所以, 界面层的存在和厚度的增加增强了硬磁相与软磁相之间的交换耦合作用。

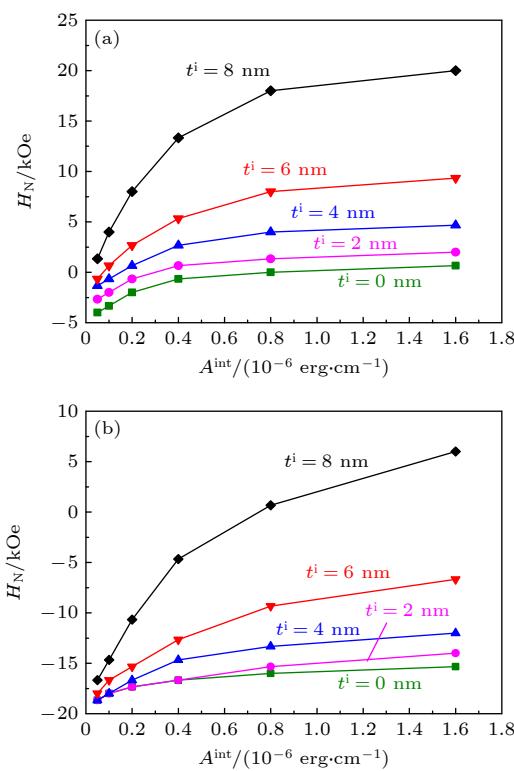


图9 界面层厚度 t^i 不同时 SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) 双层膜的成核场 H_N 随界面交换耦合常数 A^{int} 的变化曲线 (a) 易轴平行膜面; (b) 易轴垂直膜面

Fig. 9. Nucleation field H_N as a function of the interface exchange energy constant A^{int} for various interface layer thicknesses t^i in SmCo(5 nm)/Fe($10-t^i$ nm) bilayers. (a) and (b) show the curves of the easy axis parallel and perpendicular to the film plane, respectively.

5 结 论

本文运用三维微磁学数值模拟软件 OOMMF 研究了界面原子扩散形成的界面层(在软磁层一侧)对易轴平行取向和垂直取向 SmCo/Fe 双层膜

退磁过程的影响。计算了退磁曲线、磁能积、膜面内和厚度方向的自旋分布。两种取向体系的计算结果相同之处是: 随着界面层厚度的增加, 成核场增加; 体系自旋的偏转过程是软磁相自旋的偏转通过第一界面和第二界面自旋的交换耦合作用带动界面层和硬磁层的自旋偏转; 膜厚方向的自旋分布都表明自旋翻转要经历三步过程, 即磁畴壁的成核、扩展和不可逆移动。对于平行取向的体系, 随着界面层的增加, 剩磁减小(因成核在第二象限), 钉扎场增加, 最大磁能积先增大后减小, 体系由交换弹簧过渡到刚性磁体; 矫顽力等于钉扎场, 即矫顽力机制为钉扎; 膜面内自旋的偏转是 flower 态和 C 态的产生和消失过程。对于垂直取向的体系, 随着界面层的增加, 最大磁能积单调增加, 剩磁增加(因成核在第一象限), 钉扎场变化不大; 膜面内自旋的偏转是涡旋态的产生和消失过程。另外, 随着 SmCo 原子扩散比例的增加, 易轴平行膜面的 SmCo/Fe 双层膜的成核场和钉扎场增加, 剩磁减小, 最大磁能积先增加后减小。理论计算模型与现有实验结果定性一致。计算表明: 在双层膜 SmCo/Fe 体系中, 界面层的存在及其厚度的增加, 硬磁相与软磁相之间的交换耦合增强。

参 考 文 献

- [1] Kneller E F, Hawing R 1991 *IEEE Trans. Magn.* **27** 3588
- [2] Neu V, Häfner K, Patra A K, Chultz L 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 5116
- [3] Brown W F 1945 *Rev. Mod. Phys.* **17** 15
- [4] Pellicelli R, Solzi M, Neu V, Pernechele C 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 115002
- [5] Zhao Q, He X X, Morvan F J, Zhang X F, Zhao G P, Li Z B, Ma Q 2019 *J. Magn. Magn. Mater.* **476** 40
- [6] Cui W B, Takahashi Y K, Hono Y 2012 *Adv. Mater.* **24** 6530
- [7] Xia J, Zhao G P, Zhang H W, Cheng Z H, Feng Y P, Ding J, Yang H T 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 013918
- [8] Skomski R, Coey J M D 1993 *Phys. Rev. B* **48** 15812
- [9] Deng Y, Zhao G P, Bo N 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 037502 (in Chinese) [邓娅, 赵国平, 薄鸟 2011 物理学报 **60** 037502]
- [10] Liu Y L, Zhou J J, Wang X, Ma Q, Liu F, Liu J, Zhao T Y, Hu F X, Sun J R, Shen B G 2020 *J. Magn. Magn. Mater.* **513** 167162
- [11] Li Y Q, Yue M, Wu Q, Wang T, Cheng C X, Chen H X 2015 *J. Magn. Magn. Mater.* **394** 117
- [12] Liu D, Ma T Y, Wang L C, Liu Y L, Zhao T Y, Hu F X, Sun J R, Shen B G 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** 135002
- [13] Fan J P, Zhang X Y, Dong W J, Bai Y H, Xu X H 2019 *Appl. Phys. A* **125** 111
- [14] Wang J P, Shen W K, Bai J M, Victora R H, Judy J H, Song W L 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 142504
- [15] Chen C W, Xiang Y 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 127502 (in Chinese) [陈传文, 项阳 2016 物理学报 **65** 127502]

- [16] Zhao Q, Chen J, Wang J Q, Zhang X F, Zhao G P, Ma Q 2018 *Sci. Rep.* **7** 4286
- [17] Zhang J, Takahashi Y K, Gopalan R, Hono K 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 122509
- [18] Zhang J, Wang F, Zhang Y, Song J Z, Zhang Y, Shen B G, Sun J R 2012 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **12** 1109
- [19] Zhang J, Li Y X, Wang F, Shen B G, Sun J R 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 043911
- [20] Neu V, Sawatzki S, Kopte M, Mickel C, Schultz L 2012 *IEEE Trans. Magn.* **48** 3599
- [21] Sawatzki S, Heller R, Mickel C, Seifert M, Schultz L, Neu V 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 123922
- [22] Weng X J, Shen L C, Tang H, Zhao G P, Xia J, Morvan F J, Zou J 2019 *J. Magn. Magn. Mater.* **475** 352
- [23] Zhang X C, Zhao G P, Xia J, Yue M, Yuan X H, Xie L H 2014 *Chin. Phys. B* **23** 097504
- [24] Asti G, Solzi M, Ghidini M, Neri F M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 174401
- [25] Sang C X, Zhao G P, Xia W X, Wan X L, Morvan F J, Zhang X C, Xie L H, Zhang J, Du J, Yan A R, Liu P 2016 *Chin. Phys. B* **25** 037501
- [26] Choi Y, Jiang J S, Ding Y, Rosenberg R A, Pearson J E, Bader S D, Zambano A, Murakami M, Takeuchi I, Wang Z L, Liu J P 2007 *Phys. Rev. B* **75** 104432
- [27] Jiang J S, Pearson J E, Liu Z Y, Kabius B, Trasobares S, Miller D J, Bader S D, Lee D R, Haskel D, Srajer G, Liu J P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5293
- [28] Jiang J S, Pearson J E, Liu Z Y, Kabius B, Trasobares S, Miller D J, Bader S D 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 10K311
- [29] Liu Y Z, Wu Y Q, Kramer M J, Choi Y, Jiang J S, Wang Z L, Liu J P 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 92502
- [30] Choi Y, Jiang J S, Pearson J E, Bader S D, Kavich J J, Freeland J W, Liu J P 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 072509
- [31] Zhao Q, He X X, Morvan F J, Zhang X F, Zhao G P, Li Z B, Li L F, Liu Y L 2020 *J. Magn. Magn. Mater.* **495** 165858
- [32] Si W J, Zhao G P, Ran N, Peng Y, Morvan F J, Wan X L 2015 *Sci. Rep.* **5** 16212
- [33] Donahue M J, Porter D G 1999 *OOMMF User's Guide*, Version 1.0 (Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology)
- [34] Gilbert T L 2004 *IEEE Trans. Magn.* **40** 3443
- [35] Gilbert T L 1955 *Phys. Rev.* **100** 1243
- [36] Landau L, Lifshitz E 1935 *Physik. Z. Sowjetunion* **8** 153
- [37] Thiaville A, Rohart S, Jué É, Cros V, Fert A 2012 *Europhys. Lett.* **100** 57002
- [38] Huang Z Y 2003 *J. Comput. Math.* **21** 33
- [39] Zhang W, Zhao G P, Yuan X H, Ye L N 2012 *J. Magn. Magn. Mater.* **324** 4231
- [40] Peng Y, Zhao G P, Wu S Q, Si W J, Wan X L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 167505 (in Chinese) [彭懿, 赵国平, 吴绍全, 斯文静, 万秀琳 2014 物理学报 **63** 167505]
- [41] Zhao Q, He X X, Morvan F J, Zhao G P, Li Z B 2020 *Chin. Phys. B* **29** 037501
- [42] Zhao G P, Deng Y, Zhang H W, Chen L, Feng Y P, Bo N 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 093928

Micromagnetic studies of influence of interface atomic diffusion on magnetic properties of SmCo/Fe exchange-spring bilayers*

He Xin-Xin Zhao Qian[†]

(College of Science, Inner Mongolia University of Science and Technology, Baotou 014010, China)

(Received 2 April 2021; revised manuscript received 23 May 2021)

Abstract

In this paper, based on three-dimensional micromagnetic numerical simulation, the influences of the interface layer formed by the atomic diffusion at the interface on magnetic properties in parallel SmCo/Fe bilayer and perpendicular SmCo/Fe bilayer are investigated. For the parallel system, whose nucleation occurs in the second quadrant, as the interface layer thickness increases, the nucleation field and the pinning field increase gradually though the remanence decreases gradually, hence the maximum energy product first goes up and then comes down. As a result, in the system there occurs the transition from the exchange-spring to the rigid magnet. For the perpendicular system, with the increase of the interface layer thickness, a gradual transition from the first quadrant to the second quadrant happens to its nucleation. Although the pinning field experiences the changes from decreasing to unchanging and to increasing, the nucleation field and remanence both rise gradually. Therefore, the energy product is enhanced gradually. During the demagnetization, there appears a spin deviation within the film plane: the parallel system shows a progress of generation and disappearance of the *flower* and *C* states; however, the perpendicular system shows a progress of generation and disappearance of the *vortex* state. With the increase of the ratio of the SmCo atomic diffusion in the interface layer of parallel SmCo/Fe bilayers, the nucleation and pinning field go up, but the remanence decreases, and hence the maximum energy product first rises and then drops. For the two easy axis orientations and any interface layer thickness, the nucleation field rises with the increase of interface exchange energy constant, indicating that the existence of an interface layer between the soft layer and hard layer enhances the exchange coupling interaction between them. The model in this paper well simulates the relevant experimental results [[2007 Appl. Phys. Lett. 91 072509](#)].

Keywords: micromagnetic numerical simulation, interface layer, nucleation field, energy product

PACS: 75.70.Cn, 75.40.Mg, 75.30.Gw

DOI: [10.7498/aps.70.20210623](https://doi.org/10.7498/aps.70.20210623)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51861030) and the Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. 2019MS01002).

† Corresponding author. E-mail: zhaoqianqm@163.com