

Mody normalne w magnetycznym łańcuchu

L. Dubiel¹, A. Wal¹, M. Kuźma¹

¹Katedra Biofizyki, Wydział Matematyczno-Przyrodniczy, Uniwersytet Rzeszowski
ul. Pigonia 1, 35-310 Rzeszów
e-mail adres: lukasz.dubiel@jf.edu.pl

W ostatnich latach dużą uwagę zwraca się na badanie dynamiki magnetyzacji w nanoskopowych układach magnetycznych. Wzbudzenia w takich układach mogą mieć charakter tzw. modów normalnych, tj. sinusoidalnych oscylacji wszystkich elementów układu z taką samą częstotliwością. W pracy analizowane są tego typu wzbudzenia dla jednakowych momentów magnetycznych umieszczonych w węzłach łańcucha ograniczonego warunkami brzegowymi Borna-Karmana. W obliczeniach wykorzystano formalizm macierzy dynamicznej pozwalający wyznaczyć zarówno częstotliwości jak i profile obserwowanych modów dla układu swobodnego, tj. niepoddanego działaniu zewnętrznych pól, jak i w obecności stałego pola magnetycznego.

Słowa kluczowe: Hamiltonian dynamical matrix method, macierz dynamiczna, wzbudzenie magnetyczne, nonmagnesy

I. METODA MACIERZY DYNAMICZNEJ

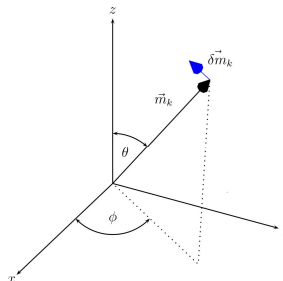
Znalezienie częstotliwości modów normalnych dla układów magnetycznych może odbywać się zarówno z pomocą metod analitycznych [1, 2, 3, 4] jak i mikromagnetycznych technik numerycznych [5, 6]. Innym rozwiązaniem jest użycie techniki HDDM (Hamiltonian dynamical matrix method) [7, 8]. Jest ona analogiczna do techniki wyznaczania drgań atomów w kryształach i posługuje się formalizmem macierzy dynamicznej. Elementy takiej macierzy buduje się w oparciu o rozwinięcie, z uwzględnieniem wyrazów z drugą pochodną, gęstości energii wokół punktu równowagi. Powstające w oparciu o taką macierz równania prowadzą do ogólnego zespolonego hermitowskiego zagadnienia własnego. Zaletą metody jest możliwość znalezienia wszystkich częstotliwości i profili obserwowanych modów spinowych w jednym kroku obliczeniowym.

Użycie metody HDMM w przypadku quasi-jednowymiarowym wymaga podziału układu na sieć komórek ułożonych jedna obok drugiej tak, że tworzą łańcuch wzdłuż osi y. Komórki ponumerowane są kolejno od 1 do N. W każdej zdefiniowany jest zredukowany wektor magnetyzacji $\vec{m}_k = \vec{M}_k / M_s$, gdzie \vec{M}_k jest wektorem magnetyzacji w komórce k, a M_s to namagnesowanie nasycenia (moduł wektora magnetyzacji), zaś $k = 1, 2, \dots, N$. W sferycznym układzie współrzędnych związanym z każdą komórką wektor \vec{m}_k da się zapisać jako

$$\vec{m}_k = (\sin \theta_k(t) \cos \varphi_k(t), \sin \theta_k(t) \sin \varphi_k(t), \cos \theta_k(t)) \quad (1)$$

Kąty θ_k i φ_k to odpowiednio kąty biegunowy i azymutalny (patrz rys. 1).

Wyjściowym punktem obliczeń jest znalezienie stanu równowagi $\dot{\vec{M}} = 0$ momentów magnetycznych dla zadanych warunków, tj. przyłożonych pól i rozkładu magnetyzacji w badanym materiale. Stan ten opisany jest przez zadanie orientacji każdego wektora \vec{M}_k poprzez podanie związanych z nim kątów θ_k i φ_k . Jeśli uwzględnimy teraz niewielkie odchylenia wektora od położenia równowagi, zależność czasowa tych kątów może być zapisana jako



RYŚ. 1. Sferyczny układ współrzędnych dla wyznaczania wektora \vec{m}_k . $\delta \vec{m}_k$ oznacza niewielką zmianę wektora magnetyzacji będącą wynikiem drgań normalnych.

$$\begin{aligned} \theta_k(t) &= \theta_k + \delta \theta_k(t), \\ \varphi_k(t) &= \varphi_k + \delta \varphi_k(t). \end{aligned} \quad (2)$$

gdzie $\delta \theta_k(t)$ i $\delta \varphi_k(t)$ to niewielkie zmiany w czasie kątów w komórce o numerze k, mierzone w stosunku do położenia równowagi.

Dla znalezienia równania ruchu dla wektorów magnetyzacji \vec{m}_k konieczne jest rozważenie energii układu i jej zmian powodowanych przez zmiany orientacji wektorów magnetyzacji. Będziemy rozważać następujące oddziaływania prowadzące do zmiany gęstości energii E układu zdefiniowanej jako $E = \tilde{E} / V$, gdzie \tilde{E} to energia, a V to objętość. Po pierwsze uwzględniamy oddziaływanie z polem magnetycznym, tj. energię Zeemana

$$E_{ext} = \mu_0 M_s \vec{H} \cdot \sum_{k=1}^N \vec{m}_k \quad (3)$$

μ_0 oznacza przenikalność magnetyczną próżni, a \vec{H} przyłożone zewnętrzne pole magnetyczne. Drugim składnikiem gęstości energii jest oddziaływanie wymienne w naszym przypadku ograniczone do najbliższych sąsiadów

$$E_{exch} = A \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^2 \frac{1 - \vec{m}_k \cdot \vec{m}_n}{a_{kn}^2} \quad (4)$$

gdzie A jest stałą związaną z oddziaływaniem wymiennym, a_{kn} to odległość od środków komórek k i n , podczas gdy n numeruje najbliższych sąsiadów komórki k . W pracy nie uwzględniamy oddziaływań związanych z własnościami materiału, tj. oddziaływań związanych z energią demagnetyzacji i anizotropii.

Założmy, że zmiany kątów wokół położenia równowagi mają charakter opisany modami normalnymi, tj. są typu sinusoidalnego i mają stałą częstotliwość, oznacza to, że

$$\begin{aligned} \delta\theta(t) &= \delta\theta_0(t)e^{i\omega t} \\ \delta\varphi(t) &= \delta\varphi_0(t)e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (5)$$

gdzie $\delta\theta_0$ i $\delta\varphi_0$ to amplitudy niewielkich wychyleń z położenia równowagi. Aby znaleźć częstość ω sinusoidalnych drgań momentu magnetycznego oraz jego wychylenia $\delta\theta$ i $\delta\varphi$, należy rozwiązać układ równań [8]

$$\begin{aligned} -\frac{E_{\theta\varphi}}{\sin\theta} \delta\varphi - \frac{E_{\theta\theta}}{\sin\theta} \delta\theta - \tilde{\lambda} \delta\varphi &= 0 \\ -\frac{E_{\varphi\varphi}}{\sin\theta} \delta\varphi - \frac{E_{\varphi\theta}}{\sin\theta} \delta\theta - \tilde{\lambda} \delta\theta &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

gdzie $\tilde{\lambda} = i\omega M_s / \gamma$, a symbol $E_{\alpha\beta}$ oznacza drugą pochodną gęstości energii kolejno względem zmiennej α i β .

Przedstawione wyniki można uogólnić na przypadek wielu momentów, z których każdy jest związany z jedną z komórek przedstawionych schematycznie na rysunku 2. W tym przypadku gęstość energii E związana będzie z oddziaływaniem każdego momentu magnetycznego z polem zewnętrznym oraz z jego sąsiadami. Wówczas energię wszystkich oddziałujących komórek można opisać wzorem

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^N \left[E_{\varphi_n\varphi_l} \delta\varphi_n \delta\varphi_l + 2E_{\varphi_n\theta_l} \delta\varphi_n \delta\theta_l \right] + E_{\theta_n\theta_l} \delta\theta_n \delta\theta_l \quad (7)$$

Występujące w wzorze (7) sumy mogą przebiegać po mniejszej liczbie komórek, jeśli ograniczymy się tylko do oddziaływań z najbliższymi sąsiadami. Wykorzystując zależności (6) i (7) otrzymamy następujący układ $2N$ równań (k = 1, 2, ..., N)

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N \left(-\frac{E_{\theta_k\varphi_l}}{\sin\theta_k} \right) \delta\varphi_l + \sum_{l=1}^N \left(-\frac{E_{\theta_k\theta_l}}{\sin\theta_k} \right) \delta\theta_l - \tilde{\lambda} \delta\varphi_k &= 0 \\ \sum_{l=1}^N \left(\frac{E_{\varphi_k\varphi_l}}{\sin\theta_k} \right) \delta\varphi_l + \sum_{l=1}^N \left(\frac{E_{\varphi_k\theta_l}}{\sin\theta_k} \right) \delta\theta_l - \tilde{\lambda} \delta\theta_k &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Układ ten ma rozwiązanie, jeśli znika jego wyznacznik, a warunek ten pozwala znaleźć częstość drgań układu ω . Poprzez odpowiednie zmiany kolejności kolumn i wierszy w macierzowej postaci równania (8) można doprowadzić go do następującego zagadnienia własnego

$$Cv = \tilde{\lambda}v \quad (9)$$

gdzie v jest wektorem własnym zbudowanym z kątów $\delta\theta$ i $\delta\varphi$, $v = (\delta\varphi_1, \delta\theta_1, \delta\varphi_2, \delta\theta_2, \dots, \delta\varphi_N, \delta\theta_N)^T$, a C jest macierzą, której elementy mają postać

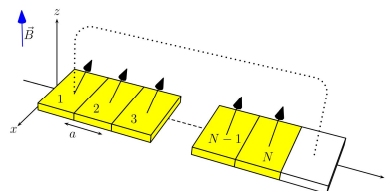
$$\begin{aligned} C_{2k-1, 2l-1} &= -\frac{E_{\theta_k\varphi_l}}{\sin\theta_k} & C_{2k-1, 2l} &= -\frac{E_{\theta_k\theta_l}}{\sin\theta_k} \\ C_{2k, 2l-1} &= \frac{E_{\varphi_k\varphi_l}}{\sin\theta_k} & C_{2k, 2l} &= \frac{E_{\varphi_k\theta_l}}{\sin\theta_k} \end{aligned} \quad (10)$$

gdzie indeksy k i l zmieniają się od 1 do N . Rozwiązanie zagadnienia własnego (9) wyznacza częstość ω poprzez jej relację z $\tilde{\lambda}$, a dla każdej częstości otrzymujemy wektor własny

v określający profil modów normalnych drgań poprzez podanie zmiany wektora momentu magnetycznego $\delta\vec{m}_k$ w każdej z k komórek.

II. MODEL

W pracy przyjęto rozkład N momentów magnetycznych \vec{m}_k wzdłuż skończonego łańcucha. Każdy dipol magnetyczny związany jest z komórką o kształcie prostopadłościanu, którego wysokość (w kierunku osi z) jest mało w porównaniu z pozostałymi wymiarami. Komórki rozmieszczone są wzdłuż osi y , a ich szerokość w tym kierunku wynosi a - jest to również odległość pomiędzy oddziałującymi momentami magnetycznymi. W modelu zastosowano periodyczne warunki brzegowe Borna-Karmana, tzn. po elemencie N następuje element 1 ($N+1=1$).



RYŚ. 2. Warunki brzegowe dla łańcucha z rozmieszczonymi momentami magnetycznymi. Kropkowana linia pokazuje, że w komórce N następuje komórka 1. Wektory umieszczone w komórkach oznaczają dipole magnetyczne.

Jak już wspomniano wcześniej w modelu uwzględnione zostaną tylko oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym \vec{H} oraz wzajemne oddziaływania z sąsiednimi momentami magnetycznymi. Oznacza to, że występujące we wzorze (7) pochodne gęstości energii są sumą odpowiednich pochodnych ze wzorów (3) i (4), tj.

$$\frac{\partial^2 E}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l} = \frac{\partial^2 E_{ext}}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l} + \frac{\partial^2 E_{exch}}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l}, \quad (11)$$

gdzie wskaźniki $\alpha, \beta \in \{\varphi, \theta\}$, zaś indeksy k i l numerują komórki, tj. przyjmują wartości od 1 do N . Wielkości występujące we wzorze (11) przedstawić można jako odpowiednie pochodne momentów magnetycznych \vec{m}_k . Zgodnie z pracą [10] dla oddziaływania z polem magnetycznym otrzymamy następujący wzór

$$\frac{\partial^2 E_{ext}}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l} = \begin{cases} \mu_0 M_s \vec{H} \cdot \frac{\partial^2 E_{ext}}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l}, & l = k \\ 0 & l \neq k \end{cases} \quad (12)$$

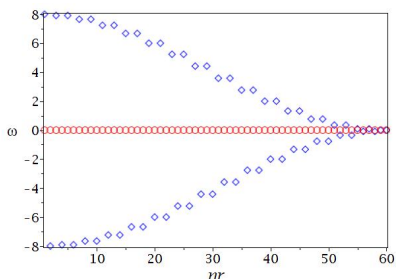
natomiast dla oddziaływania wymiennego

$$\frac{\partial^2 E_{exch}}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l} = \begin{cases} 2A \sum_{n=1}^2 \frac{\partial^2 \vec{m}_k}{\partial\delta\alpha_k \partial\delta\beta_l} \cdot \vec{m}_n & l = k \\ -2A \frac{1}{a^2} \frac{\partial \vec{m}_k}{\partial\delta\alpha_k} \cdot \frac{\partial \vec{m}_l}{\partial\delta\beta_l} & l, k \text{ sąsiadzi} \\ 0 & l \neq k \end{cases} \quad (13)$$

Występujące we wzorach wielkości oznaczają: a - odległość pomiędzy środkami sąsiednich komórek, μ_0 - przenikalność magnetyczną próżni. Występujące we wzorze (13) sumowanie (pierwszy wiersz wzoru) obejmuje najbliższych sąsiadów, czyli dla łańcucha dwie sąsiednie komórki. Dalsze obliczenia przeprowadzono dla modelu teoretycznego, w którym stałe fizyczne występujące w powyższych wzorach przyjęto za równe 1 w odpowiadających im jednostkach. Długość łańcucha ograniczono zaś do $N = 30$ komórek.

III. DRGANIA SWOBODNE ŁAŃCUCHA

W obliczeniach w tym punkcie uwzględniamy tylko oddziaływanie wymienne. W tym przypadku początkowe wartości kątów φ oraz θ nie mają wpływu na wynik - sytuacja fizyczna jest w pełni symetryczna względem zmiany tych kątów. Dozwolone wartości częstotliwości otrzymane w metodzie HDMM przedstawiono na rys. 3.

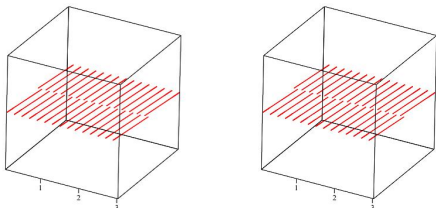


RYS. 3. Dozwolone wartości częstotliwości dla swobodnego łańcucha składającego się z $N = 30$ węzłów. Na osi poziomej umieszczony jest kolejny numer wartości własnej w metodzie HDMM, a na osi pionowej wartość częstotliwości ω . Znakami rombu oznaczono wartości rzeczywiste ω , a okręgami wartości urojone.

Jak widać na rys. 3. kolejne wartości częstotliwości występują naprzemiennie jako liczby dodatnie i ujemne. Odpowiadają im takie same rozkłady kątów $\delta\varphi$ i $\delta\theta$ oraz przypisane im wartości zmiany momentu magnetycznego $\delta\vec{m}_k$ (patrz rys. 4 dla pierwszych dwóch wartości ω).

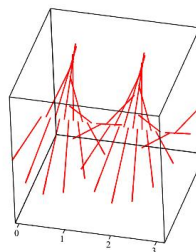
$\omega_1 = 8$

$\omega_2 = -8$



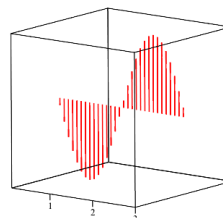
Rys. 4. Rozkład zmian momentu magnetycznego $\delta\vec{m}_k$ dla kolejnych komórek łańcucha. Liczby na osi poziomej oznaczają odległości od początku układu współrzędnych przy przyjęciu skali, dla której szerokość komórki wynosi $a = 0.1$.

Oprócz rozwiązań płaskich, tj. takich, dla których wektory $\delta\vec{m}_k$ leżą prawie w jednej płaszczyźnie i mają podobną długość (patrz rys. 4), istnieją rozwiązania przestrzenne, gdzie wspomniane wektory tworzą dyskretny odpowiednik fali przestrzennej (rys. 5). Pamiętać przy tym należy, że przedstawiane tutaj rozwiązania dotyczą wybranej początkowej chwili czasu $t = 0$.



RYS. 5. Zmiany wektora magnetyzacji dla częstotliwości ω_3 . Odległości pomiędzy komórkami łańcucha przyjęto jak na rysunku 4.

Istnieją także rozwiązania, dla których drgania mają kształt fali sinusoidalnej i odbywają się w jednej płaszczyźnie. W naszym przypadku dotyczą one np. częstości o numerze ω_{58} (patrz rysunek 6).



RYS. 6. Zmiany wektora magnetyzacji dla częstotliwości ω_{58} . Odległości pomiędzy komórkami łańcucha przyjęto jak na rysunku 4.

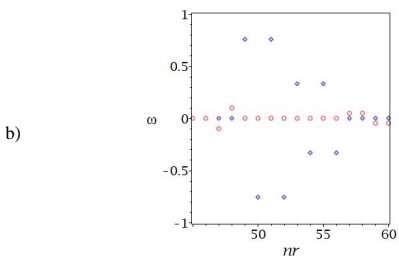
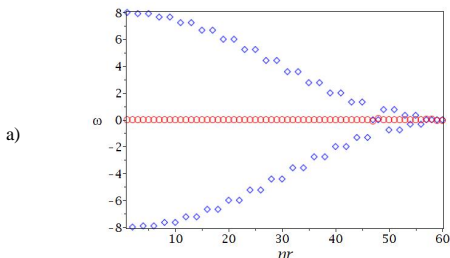
IV. DRGANIA ŁAŃCUCHA W POLU MAGNETYCZNYM

Ustawienia początkowe momentów magnetycznych są w tym przypadku takie same jak dla drgań swobodnych. Pole magnetyczne może się jednak zmieniać co do kierunku (wartość pola pozostawiamy taką samą). Rozważymy szczegółowo trzy przypadki: a) kierunek pola prostopadły do momentów magnetycznych, b) kierunek pola równoległy i zgodny z kierunkiem momentów magnetycznych, c) kierunek pola równoległy i przeciwnie skierowany w stosunku do momentów magnetycznych.

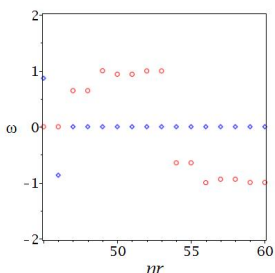
Rozważmy przypadek a). Wyznaczone dla niego częstotliwości przedstawiono na rys. 7. Należy zaznaczyć, że tym razem występują także niezerowe wartości części zespolonej tej wielkości fizycznej (patrz rys. 7b). Świadczą one o występowaniu drgań tłumionych w układzie dla tych właśnie wartości częstotliwości. Dla warunków wybranych do obliczeń, tj. $\varphi = 0.1, \theta = \pi/2$ oraz wektora pola \vec{H} skierowanego wzdłuż osi

y układu występuje tylko sześć drgań z zespolonymi niezerowymi wartościami częstości.

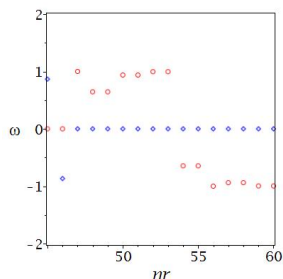
Przypadek b) i c) są do siebie podobne, występują jednak niewielkie różnice w otrzymanych wartościach częstości drgań – porównaj rysunki 8 i 9 dla numerów częstości od 47 do 49.



RYS. 7. a) Wartości częstości dla drgań łańcucha w obecności pola magnetycznego ($\vec{H} \perp \vec{m}_k$). Część b) rysunku to powiększony fragment obejmujący częstości o numerach od 45 do 60.



RYS. 8. Wartości częstości dla drgań łańcucha w obecności pola magnetycznego (\vec{H} równoległe i zgodnie skierowane w stosunku do \vec{m}_k). Na wykresie zaznaczono częstości o numerach od 45 do 60.



RYS. 9. Wartości częstości dla drgań łańcucha w obecności pola magnetycznego (\vec{H} równoległe i przeciwnie skierowane w stosunku do \vec{m}_k). Na wykresie zaznaczono częstości o numerach od 45 do 60.

V. PODSUMOWANIE

Analizę drgań łańcucha wykonano dla warunków brzegowych Borna-Karmana (łańcuch jest równoważny wtedy okręgowi) zarówno bez pola magnetycznego jak i w jego obecności. Należy zaznaczyć, że przedstawione rozwiązanie dotyczy oscylacji o energii niewiele odbiegającej od energii położenia równowagi, inaczej mówiąc rozważane są małe drgania. Otrzymane wyniki, mimo że dotyczą prostego modelu są interesujące i mogą znaleźć zastosowania przy projektowaniu układów nanoskopowych.

W pracy pokazano, że w zależności od częstości drgań, czyli związanej z nimi energii układu, można wyróżnić różną symetrię drgań. Dla łańcucha swobodnego, tj. niepoddanego oddziaływaniu zewnętrznego pola występują m.in. oscylacje zawarte tylko w jednej płaszczyźnie. W obecności pola magnetycznego występują drgania, których częstość ma charakter czysto urojony. Oznacza to, że ich amplituda zanika w czasie, a więc drgania z czasem stają się coraz mniejsze. Charakter rozwiązań dla pola magnetycznego zależy oczywiście od orientacji wektora natężenia \vec{H} .

Opisane zjawiska mogą być wykorzystane do produkcji układów wytwarzających elektrony o zadanych właściwościach dotyczących ustawienia spinu oraz częstości oscylacji.

Obliczenia przeprowadzono dla modelu izotropowego ze względu na własności materiałowe i z uwzględnieniem tylko oddziaływań wymiennych i z polem magnetycznym. Interesujące byłoby uwzględnienie własności konkretnych materiałów związanych z anizotropią cech magnetycznych, a tym samym z uwzględnieniem dodatkowych oddziaływań w układzie, tj. energii anizotropii i demagnetyzacji. Wykracza to jednak poza przyjęte w rozważanym modelu uproszczenia.

[1] K. Y. Guslienko, & A. N. Slavin, J. Appl. Phys. 87, 6337 (2000)
 [2] C. E. Zaspel, B. A. Ivanov, J. P. Park, & P. A. Crowell, Phys. Rev. B 72, (2005)
 [3] R. Zivieri & F. Nizzoli, Phys. Rev. B 78, 1–23 (2008)
 [4] R. Zivieri & R. L. Stamps, Phys. Rev. B 73, (2006)
 [5] OOMMF user's guide. NIST, Gaithersburg, Md, USA
 [6] A. Romeo et al., Phys. B Condens. Matter 403, 464–468 (2008)
 [7] M. Grimsditch et al., Phys. Rev. B 70, 054409 (2004)

[8] L. Giovannini, F. Montoncello, R. Zivieri, & F. Nizzoli, J. Phys. Condens. Matter 19, 225008 (2007)
 [9] G. Consolo, G. Gubbiotti, L. Giovannini, & R. Zivieri, Appl. Math. Comput. 217, 8204–8215 (2011)
 [10] R. Zivieri & G. Consolo, Adv. Condens. Matter Phys., 1-16 (2012)