

# Локализованные магнитные неоднородности в антиферромагнетике с системой дислокаций

В.Е. Киреев<sup>1</sup>, Б.А. Иванов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт магнетизма НАН и МОН Украины, пр. Вернадского, 36-б, г. Киев, 03142, Украина

<sup>2</sup>Национальный университет им. Тараса Шевченко, пр. Глушкова, 2, г. Киев, 03127, Украина  
E-mail: bor.a.ivanov@gmail.com

Статья поступила в редакцию 24 июля 2019 г., опубликована онлайн 25 октября 2019 г.

Дислокации в кристаллической решетке антиферромагнетика являются источниками особых линий в поле вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{I}$ , похожих на дисклинации в поле вектора-директора для нематических жидких кристаллов. Одиночная атомная дислокация создает нелокализованное неоднородное состояние — спиновую дисклинацию. Показано, что «компенсированная» система дислокаций, замкнутая дислокационная петля в трехмерном АФМ или пара точечных дислокаций в двумерном (2D) АФМ создают локализованную спиновую неоднородность, похожую на солитон. Для изотропного или легкоплоскостного АФМ форма этих солитонов является эллипсоидальной или круглой в трехмерном или двумерном случаях соответственно. Геометрия дефекта решетки и солитона существенно отличается, например, плоский решеточный дефект (дислокационная петля) создает почти сферическую трехмерную неоднородность спина. При наличии анизотропии в легкой плоскости формируется доменная стенка, заканчивающаяся на линии (точках) дислокаций.

Ключевые слова: антиферромагнетик, подрешетка, дислокация, спиновая дисклинация.

## Введение

Спиновое упорядочение в антиферромагнетиках (АФМ) чувствительно к дефектам кристаллической решетки, которые разрушают подрешеточную структуру, характерную для идеального АФМ. При этом дефекты решетки могут приводить к появлению неоднородного распределения спинов. Исторически первый пример подобных неоднородностей был предложен Дзялошинским [1] и Ковалевым, Косевичем [2], которые отметили, что наличие дислокации в АФМ приводит «сбой» в разбиении на подрешетки и приводит к появлению макроскопических магнитных дефектов — дисклинаций в поле параметра порядка АФМ, вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{I}$  (далее рассматривается вектор, нормированный условием  $I^2 = 1$ ). Также как для дисклинаций в поле вектора-директора  $\mathbf{n}$  в нематических жидких кристаллах, см. [3], вектор  $\mathbf{I}$  меняется на  $-\mathbf{I}$  при обходе вокруг линии АФМ дисклинации. Появление дисклинации в кристалле с дислокацией можно объяснить тем, что любой контур, проведенный вдоль обменных связей и охватывающий ось дислокации, содержит нечетное число узлов и не допускает точного АФМ упорядочения [4]. Таким образом, дисклинации возникают для любой дислокации, вектор Бюргерса

которой является вектором трансляции, переводящей одну подрешетку в другую.

Дисклинация в АФМ может рассматриваться как антиферромагнитный вихрь с полуцелым значением  $\pi_1$  топологического заряда. Как показали Дудко и Ковалев, сходные магнитоструктурные дефекты в АФМ возникают не только при наличии дислокации, но и при наличии атомных ступенек на границе АФМ/ферромагнетик [5]. При наличии магнитной анизотропии дислокация может приводить к появлению доменной стенки, заканчивающейся на линии дислокации. АФМ дисклинации представляют собой особый тип топологически нетривиальных состояний, и их анализ представляет большой интерес для общей физики магнитных солитонов, см. монографии и обзоры [6–10]. Исследование дефектов в АФМ важно и с практической точки зрения. Уже полвека АФМ применяются для создания эффектов однонаправленной анизотропии (обменное подмагничивание, exchange bias) [11,12]. Наличие магнитоструктурных дефектов на неидеальной границе ферромагнетик/АФМ может существенно поменять характер этого эффекта, см. обзор [13]. Появление макроскопических магнитных дефектов — доменных стенок и дисклинаций — наблюдалось в тонких

пленках хрома [14]. Интерес к исследованию реальных АФМ особенно вырос в последние годы в связи с развитием новых направлений прикладной физики: фемтомагнетизма (см. обзоры [15,16]) и спинтроники АФМ (см. обзоры [17,18]). В связи с этим обстоятельством детальный анализ АФМ дисклинаций становится актуальной проблемой физики магнетизма.

К настоящему времени получено много результатов, касающихся уединенных АФМ дисклинаций. В работах [19,20] было предложено обобщение известной модели Пайерлса–Набарро для сильно анизотропных АФМ и на ее основе получены аналитические решения, описывающие как атомную, так и магнитную структуру АФМ дисклинаций и вихрей. В рамках точно интегрируемой модели синусоидального уравнения Клейна–Гордона (уравнение синус–Гордона) получены решения для систем дисклинаций и доменных стенок в АФМ [21,22]. Для слоистых АФМ с винтовой дислокацией найдены дисклинации с несингулярным ферромагнитным ядром [23]. Особенности топологического анализа АФМ дисклинаций и АФМ вихрей обсуждались в обзоре [24].

Наличие дислокации и связанной с ней дисклинации подразумевает достаточно сильное возмущение как атомной, так и магнитной структуры всего кристалла. Избыточная энергия, связанная с такими возмущениями, расходуется с ростом размера образца. Представляет интерес поиск более слабых возмущений, локализованных в конечной области пространства и обладающих конечной энергией, не зависящей от размера системы. Для атомных дислокаций такими состояниями, локализованными атомными дефектами, являются в трехмерном (3D) кристалле замкнутые дислокационные петли, а в двумерном случае (2D) — пары дислокаций противоположного знака. Подобные дефекты, в отличие от уединенной дислокации, не являются топологически устойчивыми с точки зрения топологии кристаллической решетки. Однако подобные атомные дефекты стабилизируются за счет рельефа Пайерлса и могут быть устойчивы для кристалла как дискретной системы атомов.

Настоящая работа посвящена анализу магнитных неоднородностей, порождаемых локализованными атомными дефектами. Показано, что в этом случае возникает локализованная неоднородность спинов, характерный размер которой порядка размера атомного дефекта (диаметра петли или расстояния между дислокациями в паре); при этом геометрия спиновой неоднородности может существенно отличаться от геометрии атомного дефекта. В частности, для изотропного трехмерного или двумерного АФМ возникает сферическая или круговая область возмущения АФМ порядка соответственно. При наличии магнитной анизотропии форма этой области деформируется, и при достаточно сильной анизотропии неоднородность оказывается сконцентрированной в области конечного размера вблизи атомного дефекта.

## Общие соображения и формулировка модели

Рассмотрим классическую спиновую модель. Будем считать, что векторы магнитных моментов заданы на узлах простой решетки  $i$  (кубической или квадратной), в которой могут присутствовать дислокации. Будем рассматривать векторы моментов как классические векторы  $S_i$ , имеющие постоянную длину,  $S_i^2 = S^2$ . Энергию АФМ с двухосной анизотропией можно выбрать в виде, характерном для так называемой XYZ-модели,

$$W = J \sum_{\langle ij \rangle} [S_i^x S_j^x + (1 - \lambda) S_i^y S_j^y + (1 - \lambda_1) S_i^z S_j^z]. \quad (1)$$

Здесь  $J > 0$  — значение обменного интеграла АФМ, суммирование распространяется на пары ближайших соседей, причем каждая пара учитывается один раз, величины  $\lambda_1$  и  $\lambda$  описывают магнитную анизотропию. Введение магнитной анизотропии как анизотропии взаимодействия спинов (межионная анизотропия) в интересующем нас случае слабой анизотропии не влияет на вид макроскопической модели, см. ниже, но существенно упрощает численный анализ дискретной модели. Далее будем считать, что  $\lambda_1 > \lambda > 0$ , что соответствует антиферромагнетику с наиболее трудной осью вдоль оси  $z$  и легкой осью вдоль оси  $x$  в анизотропной легкой плоскости  $xy$ . Предельный случай  $\lambda = \lambda_1 = 0$  отвечает изотропному антиферромагнетику, случай  $\lambda = 0$  соответствует чистоодноосной модели с изотропной легкой плоскостью. В дальнейшем будет исследован практически важный (и наиболее интересный) случай слабой анизотропии, когда  $\lambda \ll 1$  и  $\lambda_1 \ll 1$ . Рассмотрены простейшие геометрии задачи, т.е. пара эквивалентных дислокаций в 2D случае или плоская дислокационная петля в форме кольца, которое лежит в одной из главных атомных плоскостей решетки.

Для аналитического исследования задачи использовано макроскопическое приближение и описание АФМ в рамках модели двух подрешеток со спинами  $S_1$  и  $S_2$ . Введены их комбинации: полный спин  $S = S_1 + S_2$  и вектор антиферромагнетизма  $L = S_1 - S_2$ . В статическом случае при отсутствии внешнего магнитного поля  $S = 0$  можно рассматривать только вектор антиферромагнетизма. Удобно использовать нормированный (единичный) вектор  $I = L / |L|$ .

Известно, что наличие дислокационной петли в решетке не позволяет глобально ввести две подрешетки и определить вектор антиферромагнетизма  $I$ . Однако это можно сделать локально в нескольких областях кристалла и согласовывать подрешетки на пересечении областей. При обходе вокруг дислокационной петли согласовать подрешетки не удастся. Однако можно сделать разрез по произвольной поверхности, которая натянута на дислокационную петлю, и потребовать, чтобы на разных берегах разреза векторы антиферромагнетизма были противоположными. В двумерном

случае скачок вектора  $\mathbf{l}$  имеет место на линии, соединяющей точки, в которых расположены дислокации. Поверхность разреза или линию разреза уместно назвать мембраной или струной. Формально разрез можно выбрать по любой поверхности, опирающейся на дислокационную петлю — это никак не влияет на структурные свойства — однако разумнее определить разрез по поверхности или линии, симметрия которых близка к симметрии системы дислокаций, порождающих дисклинацию. Таким образом, в указанных выше областях можно пользоваться стандартным феноменологическим подходом, базирующемся на записи энергии системы в виде функционала вектора  $\mathbf{l}$  (подход сигма-модели, см. [10]). Энергию удобно записать в виде

$$W = \frac{A}{2} \int d\mathbf{r} \left[ \left( \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial x_i} \right)^2 + \kappa^2 l_y^2 + \kappa_1^2 l_z^2 \right]. \quad (2)$$

Здесь  $A$  — константа неоднородного обмена,  $A = JS^2/a$ ,  $\kappa^2 = \lambda Z/a^2$ ,  $\kappa_1^2 = \lambda_1 Z/a^2$ ,  $Z$  — число ближайших соседей в решетке,  $a$  — межатомное расстояние, константы анизотропии при такой записи имеют размерности обратной длины, интегрирование производится по всему магнетику за исключением областей в непосредственной близости к дислокации, в которых нарушается применимость континуального приближения. Для применимости макроскопического подхода надо считать, что анизотропия слабая и константы удовлетворяют неравенству  $\kappa, \kappa_1 \ll 1/a$ . При описании тонкой пленки АФМ в рамках 2D модели подразумевается замена  $\int d\mathbf{r} \rightarrow L \int dx dy$ , где  $L$  — толщина пленки,  $x, y$  — координаты в плоскости пленки.

Распределение вектора  $\mathbf{l}$  определяется минимизацией этой энергии с условием, что на берегах разреза этот вектор имеет скачок вида  $\mathbf{l} \rightarrow -\mathbf{l}$ . Заметим, что величина размерной константы  $A$  перед интегралом не влияет на структуру магнитной дисклинации. Естественно, дислокационная петля вызывает деформацию решетки, но в настоящей работе этот эффект не учитывается. Фактически, считается, что спиновая неоднородность не влияет на атомную структуру дислокации, в частности, величина обменных интегралов одинакова для всех пар ближайших соседей. Такое предположение качественно не влияет на результаты анализа интересующих нас чисто магнитных структур. Выход за рамки такого приближения достаточно сложен, хотя и был проведен для ряда моделей магнетиков [19,20,25].

В стандартных угловых переменных для вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$ ,  $l_x = \sin \theta \cos \varphi$ ,  $l_y = \sin \theta \sin \varphi$ ,  $l_z = \cos \theta$ , энергия (2) принимает вид

$$W = \frac{A}{2} \int dV [(\nabla \theta)^2 + (\nabla \varphi)^2 \sin^2 \theta + \kappa_1^2 \cos^2 \theta + \kappa^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi]. \quad (3)$$

Эта энергия должна быть минимизирована с учетом условия, что на верхнем и нижнем берегах разреза выполняется условие  $\mathbf{l}_+ = -\mathbf{l}_-$ , или в угловой параметризации

$$\theta_+ = \pi - \theta_-, \quad \varphi_+ = \varphi_- \pm \pi. \quad (4)$$

Вдали от дислокации для локализованного состояния направление вектора  $\mathbf{l}$  определяется направлением легкой оси (оси  $x$ ). Поскольку в нашей задаче сбой в подрешетках затрагивает только область вблизи дислокационной петли или пары, связанная с ним неоднородность в антиферромагнитной структуре будет носить локальный характер, и можно считать, что вдали от атомного дефекта  $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{e}_x$ , т.е.

$$\theta \rightarrow \pi/2, \quad \varphi \rightarrow 0. \quad (5)$$

Легко показать, что для энергии (3) уравнения  $\delta W/\delta \theta = 0$  и  $\delta W/\delta \varphi = 0$  имеют решение  $\theta = \pi/2$ ,  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$ , т.е. вектор  $\mathbf{l}$  лежит в плоскости  $x\varphi$ , проходящей через легкую и промежуточную оси. Это решение согласовано с условием (5), давая  $\theta_+ = \pi/2$  и  $\theta_- = \pi/2$ , для него неоднородность определяется исключительно  $\varphi$ . Функция  $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$  находится решением статического одномерного уравнения синус-Гордона:

$$\nabla^2 \varphi - \kappa^2 \sin \varphi \cos \varphi = 0, \quad (6)$$

условия остаются прежними:  $\varphi_+ = \varphi_- + \pi$  на разрезе и  $\varphi = 0$  на бесконечности. Энергия спиновой дисклинации записывается в виде

$$W = \frac{A}{2} \int d\mathbf{r} [(\nabla \varphi)^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi]. \quad (7)$$

Такое планарное статическое решение зависит, естественно, только от константы анизотропии в базисной плоскости, которая должна быть минимальной. Для чисто легкоплоскостного антиферромагнетика  $\kappa^2 = 0$ , и уравнение (6) переходит в линейное уравнение Лапласа,  $\nabla^2 \varphi = 0$ . В частности, это уравнение определяет потенциал электрического поля в области, в которой нет зарядов. При использовании такой электростатической аналогии условие на разрезе, а именно, наличие конечного (на величину  $\pi$ ) значения скачка потенциала  $\varphi$  означает наличие двойного слоя зарядов с постоянной плотностью. На основе этих уравнений проведем конкретный анализ структуры для практически важных случаев — тонкой пленки АФМ на основе 2D модели и трехмерного АФМ.

**Двумерная модель: АФМ с парой дислокаций**

Исследование 2D случая представляет не только академический интерес, но и существенно для практически важного случая — тонкой пленки АФМ. Толщина пленки должна быть меньше, чем расстояние между дислокациями  $R$  и чем характерный размер магнитной неоднородности, так называемая обменная длина  $1/\kappa$ . Обменная длина определяет толщину доменной стенки с разворотом вектора  $\mathbf{l}$  в более легкой плоскости. Для реальных АФМ эта обменная длина превышает 10 нм, она равна 25 нм для оксида никеля [26] и 70 нм для хрома [14]. В спинтронике используются тонкие пленки, поскольку при толщинах более 10 нм действие спинового тока становится менее эффективным. В силу этого двумерные задачи приобретают большую актуальность.

Начнем со случая изотропного АФМ. В 2D случае использование указанной выше электростатической аналогии позволяет построить точное решение для многих задач, связанных со спиновыми дисклинациями. В частности, для уединенной дисклинации с центром в начале координат решение имеет вид  $\varphi = \pm(1/2)\arg(z)$ , функция  $\arg(z)$  комплексной переменной  $z = x + iy$  понимается в стандартном смысле так, что  $\arg(z)$  изменяется на  $2\pi$  при обходе вокруг начала координат комплексной плоскости, см. например, книгу Пенроуза [27]. В стандартных угловых переменных для вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  это решение имеет вид  $\varphi = \pm\chi/2$ , знак определяет одно из возможных значений топологического заряда (индекса Франка)  $m = \pm 1$  [4], здесь и далее  $r, \chi$  — полярные координаты.

Такое же простое решение можно получить и для пары дисклинаций. Для определенности будем считать, что дислокации расположены на оси  $x$  на расстоянии  $R$  от начала координат, то есть их координаты  $(-R, 0)$  и  $(R, 0)$ . Выберем струну в виде отрезка прямой линии,  $-R < x < R, y = 0$ , см. рис. 1. Тогда решение, удовлетворяющее нужным граничным условиям, можно записать в виде суперпозиции дисклинаций с индексами Франка разного знака:

$$2\varphi = \arg(x - R + iy) - \arg(x + R + iy). \quad (8)$$

Это точное решение имеет простую геометрическую интерпретацию: его решение  $\varphi = \varphi(x, y)$  в любой точке  $x, y$  есть половина угла, под которым из этой точки виден отрезок  $-R < x < R$  на оси  $x$ . Иными словами, линии, на которых  $\varphi = \varphi_0 = \text{const}$  (изолинии) представляют собой дуги пар окружностей с радиусами  $R/|\sin 2\varphi_0|$  и центрами в точках  $x = 0, y = \pm R \cotg 2\varphi_0$ , см. рис. 1. Все эти окружности проходят через особые точки (полюса)  $x = \pm R$ , в которых направление вектора  $\mathbf{l}$  не определено и имеет место реальная сингулярность. Углом  $\varphi_0 = \pi/4$ , точнее  $\varphi_0 = \pm\pi/4$ , соответствует единственная окружность, на диаметре которой лежат по-

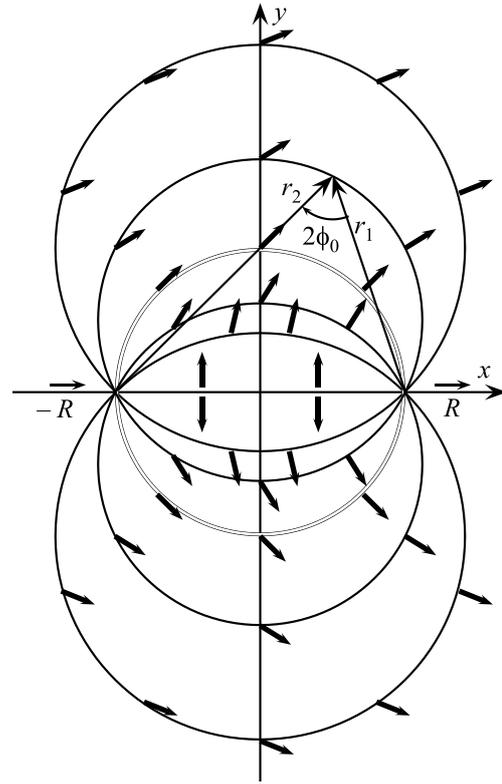


Рис. 1. Линии  $\varphi = \varphi_0 = \text{const}$  и схематическое представление распределения вектора  $\mathbf{l}$  в двумерном изотропном АФМ. Окружность, отмеченной двойной линией, соответствует значению  $\varphi_0 = \pi/4$ , линии с  $\varphi_0 < \pi/4$  и  $\pi/4 < \varphi_0 < \pi/2$  представляют собой части окружностей, находящиеся вне и внутри этой окружности.

люса, она обозначена на рис. 1 двойной линией. Значениям  $\varphi_0 < \pi/4$  или  $\varphi_0 > \pi/4$  отвечают те части окружностей, что лежат вне или внутри этой особой линии. При  $\varphi_0 \rightarrow \pm\pi/2$  радиус окружностей неограниченно возрастает, и их дуги, соответствующие этим предельным значениям, приближаются к отрезку  $-R < x < R, y = 0$  сверху или снизу (см. рис. 1).

Для конкретных расчетов достаточно знать распределение вектора  $\mathbf{l}$  в верхней полуплоскости  $y \geq 0$  и при  $y \rightarrow -y$  использовать симметрию  $l_x \rightarrow l_x$  и  $l_y \rightarrow -l_y$ ; тогда можно использовать и более привычную запись в форме

$$\text{tg } 2\varphi = \frac{2yR}{x^2 + y^2 - R^2}. \quad (9)$$

Как уже отмечалось, сингулярность (разрыв вектора  $\mathbf{l}$  на струне) является чисто формальной; распределение спинов вблизи линии, соединяющей дислокации, и вдали от полюсов имеет достаточно регулярный характер. Это свойство лучше всего видно из распределения спинов в решеточной модели, для анализа которой использована численная минимизация классической энергии (1). На рис. 2 представлено распределений спинов для случая, когда величина анизотропии пренебрежимо мала.

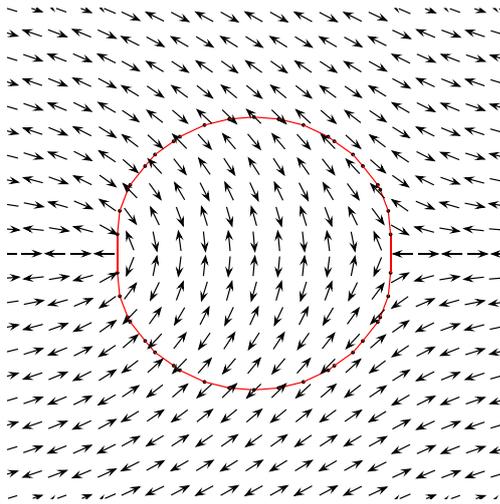


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Распределение спинов в узлах (стрелки), найденное численно для дискретной модели изотропного АФМ. Здесь и ниже на рис. 3, 4 анализ проведен для круговой области с радиусом  $30a$ , вырезанной из квадратной решетки с парой дислокаций, связанных с удалением одиннадцати узлов решетки. Для наглядности на рисунке представлена только центральная часть области, расположение осей такое же, как на рис. 1. Красной линией показан контур, на котором значение угла  $\varphi$  для вектора  $\mathbf{l}$  приблизительно соответствует значению  $\varphi = 45^\circ$ , точки на контуре соответствуют интерполяции значений угла  $\varphi$  для пар ближайших спинов.

Выше была рассмотрена модель чисто изотропного АФМ. При наличии анизотропии для случая достаточно близких дислокаций, когда расстояние между ними мало по сравнению с обменной длиной,  $R < 1/\kappa$ , в области существенной неоднородности получается практически такое же распределение. Напомним, что для реальных АФМ значение обменной длины  $1/\kappa$  значительно превышает постоянную решетки, и условие  $R < 1/\kappa$  является гораздо более жестким, чем условие применимости макроскопического подхода  $ka \ll 1$ . Если же расстояние  $R > 1/\kappa$ , то распределение спинов описывается двумерной версией статического нелинейного уравнения синус-Гордона (6). Хотя это уравнение и является интегрируемым [8,21,22], соответствующие решения не удалось построить или найти в литературе. Поэтому анализ спинового распределения при наличии анизотропии был проведен численно.

Численный анализ подтвердил, что при малой анизотропии (или близко расположенных дисклинациях)  $R \ll 1/\kappa$  в актуальной области  $r < R$ , где отклонения спинов от направления легкой оси не малы, решение (8), (9) справедливы с высокой точностью, см. рис. 2. Если же обменная длина уменьшается и становится сравнимой с расстоянием между дислокациями  $2R$ , то область существенного отклонения спинов от легкой оси ( $|\varphi| \geq 45^\circ$ ) «сплющивается» и теряет круговую симметрию (рис. 3).

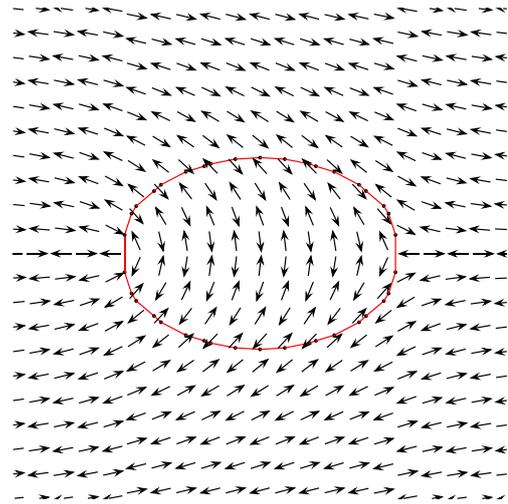


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Распределение спинов в узлах (стрелки), найденное численно для двумерного анизотропного АФМ с парой дислокаций, константа анизотропии  $\lambda = 0,005$  и  $\kappa = 0,0707/a$ , см. (1), т.е. обменная длина  $1/\kappa \approx 14a$  сравнима с расстоянием между дислокациями.

При дальнейшем росте анизотропии характерная область с  $|\varphi| \geq 45^\circ$  становится плоской, т.е. ее ширина в направлении оси  $y$  перестает зависеть от  $x$ . Вблизи отрезка, соединяющего дислокации, формируется распределение спинов такого типа, как в  $180^\circ$  антиферромагнитной доменной стенке (рис. 4).

В этом случае можно пренебречь радиальной зависимостью  $\varphi$  и рассматривать задачу (9) как одномерную

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = \kappa^2 \sin\varphi \cos\varphi, \quad (10)$$

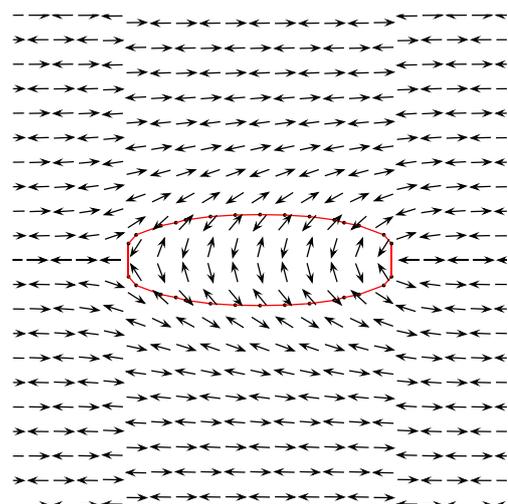


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Распределение спинов в узлах (стрелки), найденное численно для двумерного анизотропного АФМ с парой дислокаций, константа анизотропии  $\lambda = 0,05$  и  $\kappa = 0,224/a$ , см. (1), т.е. ширина стенки  $1/\kappa \approx 4,5a$ , что существенно меньше, чем расстояние между дислокациями.

где  $\xi$  — координата вдоль направления, перпендикулярного струне (совпадает с осью  $y$  в двумерном случае и с осью  $z$  для трехмерной задачи, рассмотренной в следующем разделе). Решение этого уравнения с граничными условиями типа  $\varphi \rightarrow \pm\pi/2$  при  $\xi \rightarrow \pm 0$  и  $\varphi \rightarrow 0$  при  $\xi \rightarrow \infty$  имеет вид

$$\operatorname{tg} \frac{1}{2} \varphi = \frac{\xi \exp(-\kappa |\xi|)}{|\xi|}. \quad (11)$$

Легко видеть, что для этого решения  $d\varphi/d\xi$  и  $\sin^2 \varphi$  остаются непрерывными на разрезе. Надо заметить, что из-за наличия линии разрыва вектора  $\mathbf{l}$  на струне (линии, проходящей через обе дислокации) для полученной неоднородности направления вектора  $\mathbf{l}$  вдали от солитона совпадают. Фактически, вместо доменной стенки в области между дислокациями формируется конечный фрагмент магнитной неоднородности типа локализованного магнитного солитона, длина которого определяется расстоянием между дислокациями. Однако это различие чисто формальное, и энергия такой неоднородности такая же, как для стандартной стенки.

### Трехмерная модель: АФМ с дислокационной петлей

Трехмерную задачу рассмотрим для простейшего случая дислокационной петли в форме окружности радиуса  $R$ , лежащей в одной из главных атомных плоскостей решетки (в плоскости  $xy$ ). Напомним, что минимуму энергии отвечает планарное распределение вектора  $\mathbf{l}$ , которое определяется одной угловой переменной  $\varphi$ . Распределение  $\varphi$  описывается нелинейным уравнением синус-Гордона, которое в 3D случае не является интегрируемым. Аналитическое решение для произвольной анизотропии можно получить вдали от дисклинаций, когда  $\varphi \ll 1$ . В этом приближении можно пользоваться линеаризованной версией уравнения (6),  $\nabla^2 \varphi - \kappa^2 \varphi = 0$ , фундаментальное решение которого имеет вид типа потенциала Юкавы (экранированного потенциала Кулона)  $\exp(-\kappa r)/r$ . Если же АФМ изотропный,  $\kappa = 0$ , то без ограничений на величину  $\varphi$  уравнение синус-Гордона переходит в линейное уравнение Лапласа. В этих двух случаях решение с граничными условиями (4) (скачок  $\varphi$  на величину  $\pi$  на поверхности  $z = 0$ ,  $r < R$ ) представляет собой потенциал двойного слоя зарядов, его можно записать в виде интеграла

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\partial}{\partial z} \int_D d\mathbf{r}' \frac{\exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (12)$$

где интегрирование по  $\mathbf{r}'$  распространяется на диск  $D$  радиуса  $R$ , который опирается на дислокационную петлю. Явное выражение для этого интеграла можно записать через комбинацию эллиптических интегралов,

однако определенные выводы можно сделать и без исследования этого громоздкого и малоинформативного выражения.

Прежде всего заметим, что решение (12) обладает аксиальной симметрией. В цилиндрических координатах  $\rho, z, \chi$  функция  $\varphi = \varphi(\rho, z)$ , то есть поверхности, где  $\varphi = \text{const}$ , представляют собой тела вращения с осью симметрии, параллельной оси  $z$ . В силу этого обстоятельства удобно представить поведение этой функции на плоскости  $\rho, z$ , или, что эквивалентно, представить ее сечение плоскостью, проходящей через ось  $z$  (рис. 5). Все эти поверхности проходят через сингулярную линию — окружность  $\rho = R$ , вблизи которой  $2\varphi = \arg[z / (\rho - R)]$ . Среди этих поверхностей особую роль играет поверхность  $|\varphi(\rho, z)| = \pi/4$ , которую эта окружность делит на две равные части (в этом легко убедиться из анализа поведения функции  $\varphi(\rho, z)$  вблизи линии  $\rho = R$ ). Отметим, что такое же поведение имеет место и для двумерного случая.

На оси  $z$  интеграл (12) легко вычисляется, и решение принимает вид

$$\varphi(\rho = 0, z) = \frac{\pi}{2} \left[ \frac{z \exp(-\kappa |z|)}{|z|} - \frac{z \exp(-\kappa \sqrt{R^2 + z^2})}{\sqrt{R^2 + z^2}} \right], \quad (13)$$

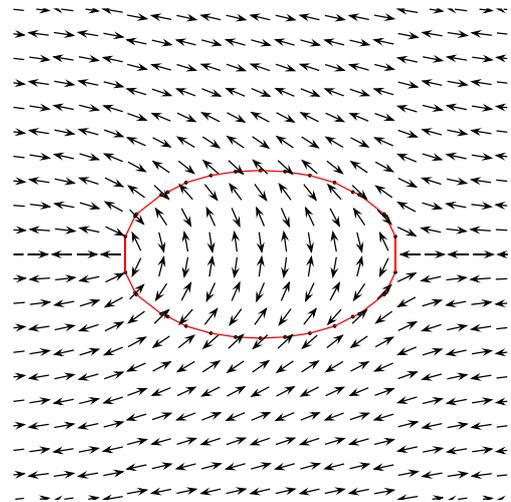


Рис. 5. Распределение спинов в узлах (стрелки), найденное численно для модели (1) с изотропным АФМ взаимодействием для приблизительно сферической области с радиусом  $30a$ , вырезанной из кубической решетки, содержащей дислокационную петлю. Петля связана с удалением из решетки фрагмента атомной плоскости, лежащего в плоскости  $xy$  и имеющего приблизительно круговую форму с радиусом  $11a$ . На рисунке представлено сечение центральной части этой области вдоль плоскости  $xy$ , оси  $x$  и  $z$  направлены на рисунке горизонтально и вертикально. Красной линией показана линия  $|\varphi| = 45^\circ$ , точки на контуре соответствуют интерполяции значений угла  $\varphi$  для пар ближайших спинов.

где первое слагаемое описывает скачок  $\varphi$  в начале координат. Анализ этого выражения проведем отдельно для изотропного случая  $\kappa = 0$  и при наличии анизотропии.

Начнем с исследования изотропного АФМ, для которого  $\kappa = 0$  и решение (13) применимо для всей оси  $z$ , в том числе при немалых  $\varphi$ . Легко видеть, что значениям  $\varphi = \pm\pi/4$  соответствуют  $z = \pm R/\sqrt{3}$ . Таким образом, характерная поверхность  $|\varphi| = \pi/4$  является заметно сплюснутой, что подтверждается численным расчетом, см. рис. 5 (для 2D случая кривая  $|\varphi| = \pi/4$  — окружность). Таким образом, для 3D изотропного АФМ кривые  $\varphi = \varphi_0 = \text{const}$  на плоскости  $z$ ,  $\rho$  «сплюснуты» по сравнению с соответствующими кривыми для 2D АФМ на плоскости  $xy$ .

Рассмотрим теперь роль анизотропии. Решение (13) показывает, что величина  $\varphi$  экспоненциально убывает при удалении от плоскости петли, таким образом происходит формирование доменной стенки. Следует ожидать, что структура этой стенки практически такая же, как для 2D случая, и функция  $\varphi(z)$  определяется формулой (11). Численный анализ подтвердил это предположение: распределения  $\varphi(x, y)$  на плоскости  $xy$  2D АФМ и  $\varphi(\rho, z)$  для 3D АФМ практически неразличимы.

### Заключение

Анализ роли дислокаций в нанобразцах магнетиков, применяемых в спинтронике, только начинается. В частности, в недавней работе [28] показано, что винтовые дислокации могут приводить к полезному эффекту — усилению эффективного спин-орбитального взаимодействия. Присутствие дислокаций является неотъемлемым свойством реальных кристаллов, в частности, тонких монокристаллических пленок, получаемых методами эпитаксии. Следовательно, можно ожидать, что в реальных образцах АФМ будут присутствовать магнитные неоднородности различного типа. В настоящей работе показано, что наличие системы дислокаций в кристаллической решетке АФМ может приводить к появлению стабильных состояний с неоднородным распределением спинов, размеры и форма которых определяется геометрией дислокаций и магнитной анизотропией АФМ. Таким образом, система атомных дислокаций порождает спиновую неоднородность (статический солитон в поле вектора  $\mathbf{I}$ ). Геометрия этой спиновой неоднородности существенно иная, чем атомной, например, плоский атомный дефект (дислокационная петля) порождает существенно трехмерную неоднородность спинов. Заметим, что подобные магнитные неоднородности могут быть связаны не только с дислокациями, но и с другими отклонениями атомной структуры от идеальной. В частности, магнитоструктурные диполи возникают вблизи неидеальной границы раздела ферромагнетик/АФМ, на которой имеется система ступенек [29].

1. И.Е. Дзялошинский, *Письма в ЖЭТФ* **25**, 110 (1977).
2. А.С. Ковалев, А.М. Косевич, *ФНТ* **3**, 259 (1977) [*Low Temp. Phys.* **3**, 117 (1977)].
3. П. де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Москва, Мир, (1974).
4. Б.А. Иванов, В.Е. Киреев, В.П. Воронов, *ФНТ* **23**, 845 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 635 (1997)].
5. О.К. Дудко, А.С. Ковалев, *ФНТ* **25**, 25 (1999) [*Low Temp. Phys.* **25**, 18 (1999)].
6. А.М. Kosevich, В.А. Ivanov, and А.С. Kovalev, *Physica D* **3**, 363 (1981).
7. А.М. Kosevich, В.А. Ivanov, and А.С. Kovalev, *Phys. Rep.* **194**, 117 (1990).
8. А.Б. Борисов, В.В. Киселев, *Нелинейные волны, солитоны и локализованные структуры в магнетиках*, УроРАН, Екатеринбург (2009).
9. Б.А. Иванов, А.К. Колежук, *ФНТ* **21**, 355 (1995) [*Low Temp. Phys.* **21**, 275 (1995)].
10. Е.Г. Галкина, Б.А. Иванов, *ФНТ* **44**, 794 (2018) [*Low Temp. Phys.* **44**, 618 (2018)].
11. W.H. Meiklejohn and C.P. Bean, *Phys. Rev.* **102**, 1413 (1956).
12. W.H. Meiklejohn, *J. Appl. Phys.* **33**, 1328 (1962).
13. M. Pankratova, A. Kovalev, and M. Zukovic, *Understanding of Exchange Bias in Ferromagnetic/antiferromagnetic Layers*, in: *Exchange Bias From Thin Film to Nanogranular and Bulk Systems, Monograph. Ser. Phys. Sci.*, Taylor and Frances, CRC Press, 205 (2017).
14. M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlic, and R. Wiesendange, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4606 (2000).
15. A. Kirilyuk, A.V. Kimel, and Th. Rasing, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2731 (2010).
16. Б.А. Иванов, *ФНТ* **40**, 119 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 91 (2014)].
17. Е.В. Гомонай, В.М. Локтев, *ФНТ* **40**, 22 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 17 (2014)].
18. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
19. О.К. Дудко, А.С. Ковалев, *ФНТ* **24**, 559 (1998) [*Low Temp. Phys.* **24**, 422 (1998)].
20. О.К. Дудко, А.С. Ковалев, *ФНТ* **26**, 821 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 603 (2000)].
21. А.В. Borisov and S.N. Ionov, *Physica D* **99**, 18 (1996).
22. А.В. Borisov and V.V. Kisieliev, *Physica D* **111**, 96 (1998).
23. В.А. Ivanov and V.E. Kireev, *JETP Lett.* **73**, 188 (2001).
24. Б.А. Иванов, *ФНТ* **31**, 841 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 635 (2005)].
25. А.С. Kovalev, А.Д. Kondratyuk, А.М. Kosevich, and А.И. Landau, *Phys. Status Solidi B* **177**, 117 (1993).
26. R. Khymyn, I. Lisenkov, V.S. Tiberkevich, А.Н. Slavin, and В.А. Ivanov, *Phys. Rev. B* **93**, 224421 (2016).
27. R. Penrose, *The Road to Reality. A Complete Guide to the Laws of the Universe*, Jonathan Cape, London (2004), Ch. 5.

28. L. Hu, Huaqing Huang, Zhengfei Wang, W. Jiang, X. Ni, Y. Zhou, V. Zielasek, M.G. Lagally, B. Huang, and F. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 066401 (2018).
29. А.С. Ковалев, М.Л. Панкратова, *ФНТ* **37**, 1085 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 866 (2011)].

в легкій площині формується доменна стінка, що закінчується на лінії (точках) дислокацій.

Ключові слова: антиферомагнетик, підгратка, дислокація, спінова дисклінація.

Локалізовані магнітні неоднорідності  
в антиферомагнетикі з системою дислокацій

В.Є. Кіреєв, Б.О. Іванов

Дислокації в кристалічній решітці антиферомагнетика є джерелами особливих ліній у полі вектора антиферомагнетизму  $\mathbf{I}$ , які схожі на дисклінації в полі вектора-директора для нематичних рідких кристалів. Одиначна атомна дислокація створює нелокалізований неоднорідний стан — спінову дисклінацію. Показано, що «компенсована» система дислокацій, замкнута дислокаційна петля у тривимірному (3D) АФМ або пара точкових дислокацій у двовимірному (2D) АФМ, створює локалізовану спінову неоднорідність, яка схожа на солітон. Для ізотропного або легкоплощинного АФМ форма цих солітонів еліпсоїдальна або кругла у тривимірному або двовимірному випадках відповідно. Геометрія дефекту решітки та солітону істотно відрізняється, наприклад, плоский ґратковий дефект (дислокаційна петля) створює майже сферичну тривимірну неоднорідність спіна. При наявності анізотропії

Localized magnetic non-uniformities in  
an antiferromagnet with a system of dislocations

V.E. Kireev and B.A. Ivanov

For antiferromagnets, lattice dislocations are the origin of the singular line in the field of the antiferromagnetic vector  $\mathbf{I}$ , common to disclinations in the field of vector-director for nematic liquid crystals. Single atomic dislocation produces non-localized state, spin disclination. It is shown that “compensated” system of dislocations, closed dislocation loop in three-dimensional (3D) AFM or pair of point dislocations in two-dimensional (2D) AFM, produces localized spin non-uniformity, common to soliton. For isotropic or easy-plane AFM the form is ellipsoidal or circular in 3D or 2D cases, accordingly. The geometry of lattice defect and soliton is significantly different, for example, the planar lattice defect (dislocation loop) produces almost-spherical 3D spin non-uniformity. In the presence of in-plane anisotropy, the domain wall ending on the dislocation line (points) is formed.

Keywords: antiferromagnet, sublattice, dislocation, spin disclination.