

УДК 537.874:519.63

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФРАКЦИИ НА ДОМЕННЫХ СТРУКТУРАХ

А.Н. Боголюбов, В.В. Серегин

(кафедра математики)

E-mail: seregin@afrodita.phys.msu.su

Анализируются методы моделирования и расчета задач дифракции на доменных границах и вертикальных блоховских линиях одноосных ферромагнетиков с цилиндрическими магнитными доменами. Рассматривается трехмерная краевая задача дифракции плоской электромагнитной волны на доменных границах и вертикальных блоховских линиях в ферритах-гранатах. В соответствии с методом анизотропного темнопольного наблюдения решение ищется в виде суперпозиции недифрагирующей и магнитооптической частей. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными.

Существует несколько моделей для описания дифракции. Проанализируем три из них: параболическое уравнение, теорию возмущения в линейном приближении по параметру гирации, междоменную область в качестве волновода. Пусть электромагнитная волна падает нормально на плоскопараллельную пластинку толщины L , вырезанную перпендикулярно оси симметрии одноосного кристалла. Дифракция является следствием координатной зависимости тензора диэлектрической проницаемости в области доменной границы. В ферромагнетиках эта зависимость связана с линейным или квадратичным магнитооптическим эффектом. Рассмотрим случай, когда квадратичный эффект мал по сравнению с линейным. Расположим ось z перпендикулярно граням пластины, в направлении падающей волны, а ось x — по нормали к доменной границе. Тогда тензор диэлектрической проницаемости примет вид (см. [1])

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_0 = \text{const}, \quad \varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx} = -i\varepsilon_0 \alpha M_z, \\ \varepsilon_{zz} = \text{const}. \end{aligned}$$

Напряженность электрического поля волны в пластине можно записать в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{F}^+(x, z) e^{ikz} + \mathbf{F}^-(x, z) e^{ik(L-z)}.$$

Типичные значения $\alpha \sim 10^{-4}$, поэтому углы дифракции малы, зависимость \mathbf{F}^+ и \mathbf{F}^- от z можно считать слабой и для описания дифракции применимо параболическое уравнение. Отбрасывая в волновом

уравнении члены второго порядка малости, получим (см. [2])

$$\pm 2ik \frac{\partial F_x^\pm}{\partial z} + \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{zz}} \frac{\partial^2 F_x^\pm}{\partial x^2} + i\alpha k^2 \text{th} \frac{x}{d} F_y^\pm = 0,$$

$$\pm 2ik \frac{\partial F_y^\pm}{\partial z} + \frac{\partial^2 F_y^\pm}{\partial x^2} + i\alpha k^2 \text{th} \frac{x}{d} F_x^\pm = 0.$$

Будем считать, что оптическая анизотропия мала:

$$\left| \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_0} - 1 \right| \ll 1,$$

и задача сводится к изучению двух независимых волн, распространяющихся под углом 45° к доменной границе. Дифракционные картины для этих волн симметричны относительно доменной границы, поэтому рассмотрим только одну из них. При $\alpha > 0$ это будет правополяризованная волна, при $\alpha < 0$ — левополяризованная. В соответствии с методом, развитым в работе [1], интенсивность дифрагированной волны выражается в квадратурах, если известны собственные функции краевой задачи:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} + (\lambda + |\alpha| k^2 d^2 \text{th} \xi) \varphi = 0, \\ |\varphi(\xi)| < \infty, \quad \xi \rightarrow \pm \infty. \end{aligned}$$

Основным ограничением данного метода является малость углов дифракции.

Если доменная граница рассматривается в качестве волновода, то основной интерес представляют электромагнитные волны, распространяющиеся

вдоль нее. Пусть магнитная среда намагничена вдоль оси z , доменная граница лежит в плоскости (yz) и описывается уравнением

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{\eta}{\delta} \sin \theta,$$

где θ — угол между осью z и направлением вектора магнитного момента, δ — толщина стенки, $\eta = \pm 1$ — поляризация доменной границы (характеризует направление вращения спинов). В рассматриваемом случае тензор диэлектрической проницаемости имеет вид (см. [3])

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & ig_1 & -ig_2 \\ -ig_1 & \epsilon_2 & 0 \\ ig_2 & 0 & \epsilon_3 \end{pmatrix},$$

$$g_1 = g_0 m_z = g_0 \cos \theta, \quad g_2 = g_0 \sin \theta.$$

Нас интересуют электромагнитные волны поверхностного типа, распространяющиеся вдоль доменной границы, поэтому будем искать решение уравнения Максвелла в виде

$$\mu = 1, \quad k_0 = \frac{\omega}{c},$$

$$-\nabla^2 \mathbf{E} + \text{grad div } \mathbf{E} = k_0^2 \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(x) e^{iky}. \quad (2)$$

Рассмотрим случай, когда $g_2 = 0$. Это условие реализуется для таких доменных границ, в которых намагниченность изменяется по величине, но не по направлению. Подстановка (2) в (1) приводит к следующей системе уравнений:

$$E_x (k^2 - \epsilon_1 k_0^2) + ikE_y' - ig_1(x)k_0^2 E_y = 0, \quad (3)$$

$$-E_y'' + ikE_x' + ig_1(x)k_0^2 E_x - \epsilon_2 k_0^2 E_y = 0, \quad (4)$$

$$-E_z'' + (k^2 - \epsilon_3 k_0^2) E_z = 0, \quad (5)$$

где штрих означает производную. Уравнение (5) имеет тривиальное решение (плоская волна, не взаимодействующая со стенкой). Уравнения (3), (4) вследствие зависимости коэффициента g_1 от x могут описывать локализованные волны, т. е. такие, что

$$E_x, E_y \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty.$$

Результат можно найти в работе [4]. Метод применим для доменных границ с неизменной по направлению намагниченностью, что в реальных материалах не встречается.

В рассмотренных методах не учитывались вертикальная блоховская линия (ВБЛ) в доменной границе, изменение намагниченности по направлению в области доменной границы, а также наклон доменной границы в области ВБЛ.

Один из подходов заключается в использовании теории возмущения [5]. Электрическое поле можно разбить на поперечную (соленоидальную) и продольную (безвихревую) составляющие. Для полей получаются неоднородные волновые уравнения, решение

этих уравнений представляется в виде суперпозиции плоских поперечных волн, которые для учета отражения от границ пленки раскладывают на s - и p -компоненты.

Опишем теперь подход, который и был применен авторами для расчета экспериментальной задачи дифракции и исключаящий перечисленные недостатки. В основу положен метод анизотропного темнопольного наблюдения. Рассматривается трехмерная задача дифракции плоской электромагнитной волны на доменной границе и ВБЛ в ферритах-гранатах. Результаты эксперимента [6] по наблюдению ВБЛ были использованы для проверки данного метода. В эксперименте [6] используется метод анизотропного темнопольного наблюдения [7] (PADO — polarized anisotropic dark field observation). Этот метод позволяет исключить из изображения рассеяние света от доменов и дает возможность оптического детектирования доменной границы и ВБЛ. Поскольку плоскую волну всегда можно разложить на две составляющие: лежащую в плоскости падения и перпендикулярную ей, то без ограничения общности можно рассмотреть только составляющую, перпендикулярную плоскости падения. В этом случае решается краевая задача относительно напряженности электрического поля для системы уравнений, полученных из уравнений Максвелла. Пусть \mathbf{M} — вектор намагниченности. В первом порядке по параметру гирации g индукция электрического поля запишется в виде

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + ig [\mathbf{M} \times \mathbf{E}].$$

Представим поле в виде суперпозиции недифрагирующей части \mathbf{E}_0 с $g = 0$ и магнитооптической части \mathbf{E}_1 , пропорциональной g . Запишем уравнения Максвелла для комплексных амплитуд, отбрасывая члены более высокого порядка:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1, \quad (6)$$

$$\text{div} (\epsilon \mathbf{E} + ig [\mathbf{M} \times \mathbf{E}]) = 0, \quad (7)$$

$$\text{rot } \mathbf{E} = ik \mathbf{B},$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0,$$

$$\text{rot } \mathbf{B} = -ik (\epsilon \mathbf{E} + ig [\mathbf{M} \times \mathbf{E}]). \quad (8)$$

Поскольку влияние намагниченности на оптические явления мало, то в уравнении (8) магнитной анизотропией можно пренебречь и положить $\mu = 1$. Подставляя (6) в (7) и оставляя только члены первого порядка по g , получим

$$\text{div } \mathbf{E}_1 = \text{div} \left(-\mathbf{E}_0 + \frac{ig}{\epsilon} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{M}] \right). \quad (9)$$

Применяя оператор ротора к (8), учитывая соотношения

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E}$$

и (9) и приравнивая члены одного порядка по g , в результате получим

$$\nabla^2 \mathbf{E}_0 + k^2 \epsilon \mathbf{E}_0 = 0, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{E}_1 + k^2 \varepsilon \mathbf{E}_1 = \\ = \frac{ig}{\varepsilon} \{ \text{grad div} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{M}] + k^2 \varepsilon [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{M}] \}. \end{aligned} \quad (11)$$

Из уравнений Максвелла (7), (8), отбрасывая члены более высокого порядка, получаем краевые задачи для составляющих \mathbf{E}_0 и \mathbf{E}_1 . В качестве граничных условий используем условие непрерывности тангенциальных составляющих электрических и магнитных полей. Поскольку домены представляют собой периодическую структуру, то для их описания по переменным x, y ставятся периодические граничные условия. Задача решалась для двух доменов с противоположно ориентированными векторами намагниченности и одной ВБЛ в доменной границе. Для описания намагниченности использовалась модель 180° доменной стенки [8]. Краевые задачи имеют вид

$$\left\{ \begin{aligned} \nabla^2 E_0 + k^2 \varepsilon E_0 &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial E_0}{\partial z} + ik_{0z} E_0 &= 2ik_{0z} e^{ik_{0x}x}, \quad z = 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial E_0}{\partial z} - ik_{0z} E_0 &= 0, \quad z = h, \\ E_0(0, y, z) &= E_0(l, y, z), \\ \frac{\partial E_0}{\partial x}(0, y, z) &= \frac{\partial E_0}{\partial x}(l, y, z), \\ E_0(x, d, z) &= E_0(x, -d, z), \\ \frac{\partial E_0}{\partial y}(x, d, z) &= \frac{\partial E_0}{\partial y}(x, -d, z), \end{aligned} \right.$$

где E_0 — единственная отличная от нуля компонента вектора \mathbf{E}_0 ,

$$\left\{ \begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{E}_1 + k^2 \varepsilon \mathbf{E}_1 = \\ = \frac{ig}{\varepsilon} \{ \text{grad div} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{M}] + \varepsilon k^2 [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{M}] \}, \\ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial z} + ik_{0z} \mathbf{E}_1 = 0, \quad z = 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial z} - ik_{0z} \mathbf{E}_1 = 0, \quad z = h, \\ \mathbf{E}_1(0, y, z) = \mathbf{E}_1(l, y, z), \\ \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial x}(0, y, z) = \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial x}(l, y, z), \\ \mathbf{E}_1(x, d, z) = \mathbf{E}_1(x, -d, z), \\ \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial y}(x, d, z) = \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial y}(x, -d, z). \end{aligned} \right.$$

Полученные краевые задачи решались методом разделения переменных, и решение представлялось в виде ряда по собственным функциям соответствующих одномерных задач. Для сходимости был использован метод регуляризации [9]. По полученному решению, т. е. по напряженности электрического поля, строилось распределение интенсивности, которая сравнивалась с экспериментальным распределением.

На рис. 1 приведены результаты проведенного физического эксперимента, а на рис. 2 показаны результаты расчетов по предложенной модели для случаев, когда волновой вектор лежит в плоскости, перпендикулярной (а) и параллельной (б) плоскости доменной границы.

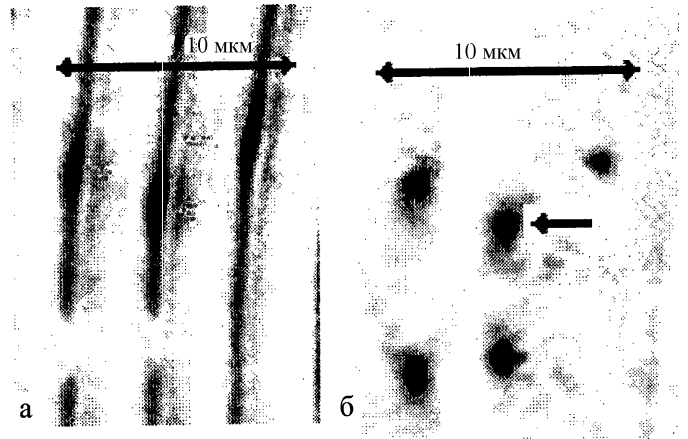


Рис. 1. Экспериментальное распределение интенсивности в случае, когда плоскость падения перпендикулярна доменной границе (а) и параллельна ей (б)

На рис. 1, а и 2, а, соответствующих первому случаю, четко видны «всплеск» и «провал» интенсивности в области доменной границы, что связано с присутствием ВБЛ и наклоном доменной границы в ту или другую сторону относительно плоскости доменной границы. Подчеркнем, что наклон происходит именно в области локализации ВБЛ. Результаты, полученные на основе рассматриваемой математической модели, полностью соответствуют данным физического эксперимента.

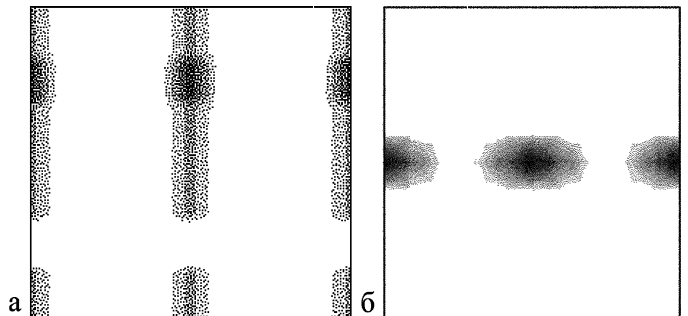


Рис. 2. Модельное распределение интенсивности для случая, когда плоскость падения перпендикулярна доменной границе (а) и параллельна ей (б). Рисунок б соответствует области экспериментального графика, отмеченного стрелкой на рис. 1, б

На рис. 1, б и 2, б, соответствующих второму случаю ориентации волнового вектора, наблюдается дифракция на ВБЛ. Видно, что и в этом случае результаты модельных расчетов хорошо согласуются с экспериментом, причем из математической модели следует, что рис. 1, б иллюстрирует картину дифракции именно на ВБЛ, которая по интенсивности существенно превышает дифракцию на доменной границе.

Авторы благодарны проф. А.С. Логгинову и его сотрудникам за предоставленные экспериментальные данные и помощь в обсуждении всех интересующих вопросов.

Литература

1. Лайхтман Б.Д., Петров В.Ю. // ФТТ. 1978. **20**, № 12. С. 3630.
2. Лайхтман Б.Д., Петров В.Ю. // ЖЭТФ. 1977. **73**, № 3(9). С. 1180.
3. Звездин А.К., Котов В.А. // ФТТ. 1976. **18**, № 4. С. 967.
4. Звездин А.К., Котов В.А. // Микроэлектроника. 1977. **6**, № 4. С. 320.

5. Петерсон В.К. // ФТТ. 1981. **23**, № 3. С. 910.
6. Логгинов А.С., Николаев А.В., Онищук В.Н. // Тр. конф. «Физика конденсированного состояния». Т. 2. Стерлитамак, 1997. С. 50.
7. Thiaville A., Boileau F., Miltat J., Arnaud L. // J. Appl. Phys. 1988. **63**, No. 8. P. 3153.
8. Малоземов А., Слоузуски Дж. Доменные стенки в материалах с цилиндрическими доменами. М.: Мир, 1982.
9. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.

Поступила в редакцию
26.11.01

УДК 536.75

О МОДЕЛИРОВАНИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ В НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМАХ

М.Б. Сайханов

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

На основе анализа квантового характера необратимости предлагается двухуровневая модель теоретического описания неравновесных систем. На первом, локальном уровне осуществляется статистическое описание квазиравновесных подсистем неравновесной системы, на втором, глобальном, — кинетическое моделирование с использованием в качестве определяющей характеристики необратимого процесса производства энтропии всей неравновесной системы. Показано, что кинетическое моделирование следует осуществлять на основе обобщения принципа минимального производства энтропии.

Введение

Одним из главных вопросов статистической термодинамики является вопрос о том, насколько общей она может быть при описании систем, далеких от равновесия [1]. В настоящее время, несмотря на многочисленные усилия исследователей, не существует единой теоретической схемы для описания неравновесных систем на основе статистической термодинамики. При этом существующие кинетические уравнения, полученные в рамках статистической термодинамики, имеют достаточно ограниченный характер применения [2, 3].

В настоящей работе показано, что на основе анализа квантового характера необратимости удастся построить единую теоретическую схему описания неравновесных систем. Моделирование необратимого процесса производится в пространстве энергетических уровней неравновесной системы и приводит к двухуровневому описанию. На первом, локальном уровне осуществляется статистическое описание квазиравновесных подсистем неравновесной подсистемы, элементы которых имеют близкие значения энергий. На втором, глобальном, — кинетическое моделирование на основе обобщения принципа минимального производства энтропии в масштабе всей неравновесной системы.

1. О квантовой природе необратимости

Анализируя концепцию необратимости в статистической термодинамике, Планк отмечает, что «необратимость находит свое исчерпывающее обоснование в существовании функции энтропии» [4]. При этом энтропия «образует первичное, общее понятие, имеющее кардинальное значение для всех типов состояний и изменений состояния, в то время как температура выводится из этого понятия лишь при добавлении специального условия теплового равновесия, при котором энтропия достигает своего максимума» [4]. На определяющий характер энтропии и второго начала термодинамики в «физике возникающего» указывает также Пригожин [3].

Известно, что в формулировке Больцмана–Планка энтропия пригодна для описания необратимых процессов как в равновесных, так и в неравновесных системах. Однако собственно планковское определение энтропии позволяет по-новому подойти к вопросу о необратимости.

Энтропию физической системы Планк определяет по формуле, математически идентичной формуле Больцмана:

$$S = k \ln P,$$

где P — число различных стационарных состояний, которые при энергии E может принимать система;