*На правах рукописи*

Абакумов Павел Владимирович

МАГНИТНЫЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ МИКРООСОБЕННОСТИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В СЛАБОФЕРРОМАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ – YFeO3, DyFeO3и α-Fe2O3

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Курск 2012

Работа выполнена в Юго-Западном государственном университете

на кафедре «Нанотехнологий и инженерной физики»

|  |  |
| --- | --- |
| **Научный руководитель:** | доктор физико-математических наук,  профессор  **Кузьменко Александр Павлович** |
| **Официальные оппоненты:** | **Неручев Юрий Анатольевич**  доктор физико-математических наук, профессор, Курский государственный университет, профессор кафедры общей физики  **Захвалинский Василий Сергеевич**  доктор физико-математических наук, Белгородский государственный университет, профессор кафедры общей и прикладной физики |
| **Ведущая организация:** | Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова |

Защита состоится 28 декабря 2012 г. в 1000 часов в конференц-зале на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.105.04 при Юго-Западном государственном университете по адресу: 305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЮЗГУ, по адресу г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Автореферат разослан 27 ноября 2012 г.

Учёный секретарь диссертационного

совета Д 212.105.04,кандидат

физико-математических наук Рослякова Л.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность проблемы**

Открытие в 1988 году эффекта гигантского магнетосопротивления стало началом развития новой области электроники – спинтроники, в которой ожидается решение проблемы согласования и взаимосвязи магнитных (запись информации) и электропроводящих (обработка информации) сред, объединенных на одной платформе. В этой связи наибольший интерес представляет группа веществ с электрическим и магнитным упорядочением – так называемые мультиферроики, характеризуемые, по крайней мере, двумя типами упорядочения различной природы[1]. В разряд этих материалов попадают исследуемые окисные соединения типа ортоферриты (**RFeO3**) и α-гематит (**α-Fe2O3**).Одной из особенностей ортоферритов является совпадение кристаллической и магнитной элементарных ячеек.Это вызывает образование четырех магнитных подрешеток как для *d*-подсистемы (магнитные ионы **Fe3+**), так и для *f*-подсистемы (иттрий **Y3+**и редкоземельные ионы**R3+**). Последняя, являясь многоэлектронной, обусловливает возникновение электрического упорядочения.Помимо этого, в **RFeO3** в определённых фазах возникает спонтанная электрическая поляризация при индуцированных магнитным полем фазовых переходах в *f-*и *d-*подсистемах. Для **α-Fe2O3**магнитное упорядочение имеет аналогичное происхождение, а образование электрического упорядочения связано с гибридизацией электронных *d*-оболочекдля **Fe3+**и *p*-оболочек**O2+**[2].В отмеченных материалах со слабоферромагнитным упорядочением ранее обнаружены рекордно высокие скорости движения доменной границы (ДГ) и разнообразие доменных структур (ДС), что делает их привлекательными для построения высокопроизводительных магнитных устройств обработки информации. Наличие в них же электрического упорядочения создает реальные перспективы построения именно на этой основе спиновых устройств и элементов, включая квантовые компьютеры с кубитовой и фитовой логикой, что свидетельствует об актуальности проводимых исследований по данной тематике.

**Цель диссертационной работы**

Целью данной диссертационной работы являлось исследование магнитных и спектральных микроособенностей доменной структуры в отдельных слабоферромагнитных материалах, обладающих разными типами магнитного и электрического упорядочения.

**Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:**

1. Создать устройство иразработать методики позиционирования пластинчатых и объемных образцов, обеспечивающие прецизионное изучение ориентационных зависимостей комбинационного (рамановского) рассеяния света.
2. Модифицировать имеющееся аппаратноеобеспечение для совмещения магнитооптических исследований с магнито-силовой микроскопией с высоким пространственным и спектральным разрешением.
3. Разработать методики визуализации и сканирования доменной структуры и доменной границы в слабоферромагнитных образцахс высокой магнитной восприимчивостью, обеспечивающие проведение наноразмерных магнитно-силовых исследований.
4. Исследовать наноразмерные особенности доменной структуры и тонкой структуры доменной границы с помощью комбинационного (рамановского) рассеяния света по гиперспектральным распределениям интенсивности выделенной из спектра линии.
5. Построить полуколичественную модель формирования гиперспектрального распределения комбинационного (рамановского) рассеяния света на магнитных неоднородностях, особенностях доменной структуры и доменных границ.

**Научная новизна работы**

1. Полученырезультаты магнитооптических и магнитно-силовых исследований микроособенностей, неоднородностей и доменных образований в прозрачных магнетиках со слабоферромагнитным упорядочением с разрешением ~ 500 и 40 нм, соответственно.
2. Обнаруженымагнитныеособенности(кинки, бризерыи др.) на статических доменных границах разных типов в **YFeO3** и **DyFeO3** в магнито-силовых исследованиях.
3. По полученным ориентационным зависимостяминтенсивности спектров комбинационного (рамановского) рассеяния света в доменах с противоположной намагниченностью для **YFeO3**визуализирована доменная структура и тонкая структура доменной границы.
4. Предложена модель формирования на магнитных неоднородностях, включая доменные границы, гиперспектральных распределений комбинационного (рамановского) рассеяния света.

**Положения, выносимые на защиту**

1. Совмещениеаппаратного обеспечения магнитооптических, магнито-силовых и конфокальных микроскопических методовдля визуализации микроособенностей структуры доменов и доменной границы.
2. Результаты магнитно-силовых исследований по визуализации тонкой структуры доменной границы в слабых ферромагнетиках **YFeO3** и **DyFeO3**.
3. Результаты спектральных исследований комбинационного (рамановского) рассеяния света на магнитных неоднородностях в доменной структуре и доменной границе.
4. Механизм формирования гиперспектрального распределения интенсивности комбинационного (рамановского) рассеяния света на особенностях, неоднородностях и доменной границе в магнитоупорядоченных средах.

**Практическая значимость работы**

Результаты, полученные в ходе выполнения работы, позволили разработать методики определения концентрации минеральных включений в обогащаемых концентратах добывающих предприятий. Разработанная методика позволяет по данным экспресс-анализа фазовых и структурных особенностей исходного сырья и продуктов переработки обогащаемых руд (железосодержащих и других) в условиях действующего производства осуществлять практически их реально-временной контроль на всех стадиях обогащения с целью его оптимизации. Подана заявка на патент № 2012110666, дата приоритета 20.03.2012.

Результаты проведенных исследований будут отражены в методических программах обучения бакалавров и магистров по направлению подготовки – 210600.62 – «Нанотехнология».

**Достоверность результатов**, представленных в диссертационной работе обеспечена обоснованностью используемых методов и воспроизводимостью экспериментальных данных, а так же использованием современных методик исследования (конфокальная, атомно- и магнитно-силовая микроскопия (АСМ, МСМ), рамановская спектроскопия).

**Апробация результатов работы:** Основные результаты работы были представлены на следующих конференциях:«Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» IX региональная научная конференция, г. Хабаровск, 14 – 16 октября 2010 г, «Нанотехнологии производству 2010» VII Международная научно-практическая конференция, г. Фрязино, 1 – 3 декабря 2010 г., «Перспективные технологи, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов» VIII Международная конференция, г. Алматы, 2011 г, «Современные инструментальные методы, информационные технологии и инновации» VIII международная научная конференция, Юго-Западный государственный университет, г. Курск, 2011 г.«SpinWaves 2011» InternationalSymposium, St. Petersburg, June 5 – 11 2011.

Работа по тематике исследований поддерживалась Федеральными целевыми программами «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (гранты П547 «Механизмы самоорганизации в наномасштабных системах по структурным и химическим данным», П913 «Наноструктурирование на границе раздела сред», П391«Рамановское рассеяние на наномасштабных объектах в гетерофазных материалах и средах с магнитным и сегнетоэлектрическим упорядочением», П947 «Комбинационное рассеяние и фотоактивационные процессы в тонких пластинах монокристаллов со структурой силленита», «Механизмы самоорганизации в наномасштабных системах по структурным и химическим данным»).

**Личный вклад автора**

Автором работы получены основные результаты, разработаны технические средства и выполнен весь объем экспериментальных исследований, проведен анализ полученных данных и предложена полуколичественная физическая модель процессов комбинационного рассеяния света в доменах слабых ферромагнетиков с противоположной намагниченностью.

**Соответствие диссертации паспорту научной специальности**. В соответствии с областью исследования специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» диссертация включает в себя теоретическое и экспериментальное исследование магнитной структуры монокристаллов ортоферритов и гематита. Полученные научные результаты соответствуют пунктам 1,4и 7 паспорта специальностив части, касающейся теоретического и экспериментального изучения физической природы свойств неорганических соединений в твердом состоянии, теоретического и экспериментального исследования воздействия различных видов излучений на природу изменений физических свойств конденсированных веществ, технического и технологического приложения физики конденсированного состояния.

**Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Общий объем диссертации составляет 122 станицы, включая 52 рисунка и 2 таблицы. Список цитируемой литературы включает 90 наименований. Основные результаты, представленные в диссертации, опубликованы в 8 научных трудах, из них 3 – в рецензируемых научных журналах.

**ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

Во **Введении** обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цели работы, а так же приводятся положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** является обзорной, составляющей основу для дальнейшего рассмотрения. Она посвящена описанию закономерностей и особенностей формирования магнитной структуры и оптических свойств материалов со слабоферромагнитным (СФМ) упорядочением: типа «легкая плоскость» (ЛП) и «легкая ось» (ЛО). Проанализированы динамические характеристики выбранных для исследования магнетиков, отмечена нелинейность и неодномерность динамики движения ДГ (одиночных спиновых волн – солитонов), возникающие квазичастичные возбуждения (магнонные, фононные, магнон-фононные), а также их реализация в образцах ограниченных размеров и резонансные взаимодействия.Обоснована возможность проявления мультиферроидальных свойств и явлений в изучаемых слабых ферромагнетиках, выявлена физическая природа такого сосуществования электрических и магнитных упорядочений. Также вней приведено теоретическое описание эффекта комбинационного (рамановского) рассеяния света (КРС), параметры, характеристики и оптические схемы используемых спектральных приборов для его измерения.Рассмотрены взаимосвязи симметрии кристаллических структур и колебательных возбуждений при электромагнитном инициировании.Приведены общие подходы к соотнесению содержания спектров с допустимыми колебаниями, учитывающиеих симметрийные свойства кристаллических структур.

**Вторая глава** посвящена описанию имеющихся технических возможностей применяемого оборудования, разработанных методик и созданных дополнительных устройств для изучения объектов исследований. Рассмотренысуществующие методы расчетов изменений в колебательных спектрах, обоснована применимость их анализа на основе расчета из первых принципов (*ab-initio*).

|  |
| --- |
| Mac_Sys:Users:admin:Desktop:Снимок экрана 2012-08-02 в 16.00.16.jpg |
| **Рис. 1.** Схема хода лучей в конфокальном микроспектрометре SolarTII |

Для осуществления всего комплекса экспериментальных исследований был задействован конфокальный зондовый рамановский микроспектрометр OmegaScopeAIST-NT (Россия).В его состав входят (рис.1) следующие основные функциональные блоки: сканирования – на базе сканирующего зондового микроскопа (СЗМ)SmartSPM, визуализации – на базе конфокальногомикроскопа, спектральный – на базе рамановскго микроспекторметра SolarTII, регистрации рассеянного излучения, включающий охлаждаемую спектроскопическую CCD камеры Andor DV420A-BV (Ирландия)с квантовым выходом (Y) – 95% и временем релаксации (τ) – 125 мс и фотоэлектронный умножитель HamamatsuR928 (Япония) с Y – 98% и τ – 22 нс, инициирования – полупроводниковый и твердотельные лазеры с умножителем частоты и диодной накачкой, дающие генерацию на следующих длинах волн и мощностях: λ = 473 нм (25 мВт), 532 нм (50 мВт) и 785 нм (80 мВт), блок управления в виде автоматизированного рабочего места.Особенностью данного комплекса оборудования является возможность применения для исследований как отдельных функциональных блоков, так и одновременно всего набора имеющихся устройств за счет высокого уровня интеграции.

Размещение всего оборудования на голографическом столе Standa (Литва) с резонансной частотой около 200 Гц и временем релаксации 50 мс исключает внешние вибрационные воздействия. Для обеспечения температурной стабилизации по темновому току CCD камера Andorохлаждается до -60оС на элементе Пельтье. Имеющийся в спектрометре набор дифракционных решеток (150, 600, 1800 Al, 1800 Auлин/мм) позволяет получать спектральное разрешение до 0.8 см-1. Наряду с высоким пространственным разрешением, обеспечиваемым фокусировкой лазеров неимерсионными объективами Mitutoyo (Япония) ×10 с числовой апертурой 0.28, ×20/0.42 и ×100/0.7 – 412 нм, это создает технические условия для проведения прецизионных микроскопических и микроспектральных исследований. Высокий уровень интегрированного включения микроспектрометра с СЗМ (за счет электронной обратной связи) обеспечивает прецизионные условия для сканирования с точностью позиционирования с ангстремным разрешением по Z оси; и по X и Y осям – 50 пм при н. у.

Для позиционирования образцов был разработан и изготовлен 5-координатный предметный стол, устанавливаемый на место СЗМ в систему ввода-вывода излучения. Две степени свободы данного стола предназначены для совмещения оси вращения гониометра с оптическим путем возбуждения/регистрации. Оставшиеся три – для позиционирования образца непосредственно под объективом конфокального микроскопа.

Для проведения магнитооптических исследований на просвет было разработано и изготовлено оптическое устройство-приставка к СЗМ, устанавливаемое непосредственно на его сканатор, что позволило производить магитооптические измерения непосредственно в процессе работы СЗМ.

В качестве объекта исследования были выбраны образцы, полученные в НИУ«Московскийэнергетический институт» методом спонтанной кристаллизации. Исследуемые образцы имели структуру перовскита с орторомбическими искажениями с магнитным упорядочением двух типов: легкая плоскость – соединение α-гематит (**α-Fe2O3**) и легкая ось –искусственно синтезированные окисные соединения типа ортоферриты (**YFeO3, DyFeO3**), характеризующиеся наличием магнитных ионов как для *d*-подсистемы (магнитные ионы **Fe3+**), так и для *f*-подсистемы (иттрий **Y3+**и диспрозий**Dy3+**). Эти магнетики обладают электрическим упорядочением, что по современной классификации переводит их в категорию мультиферроиков. Электрический тип упорядочения возникает в них либо за счет многоэлектронности *d*- и*f*-оболочек (для ортоферритов), либо – гибридизации электронных *d*-оболочекдля **Fe3+**и *p*-оболочек – **O2+**(для **α-Fe2O3**).

Использование типовых методик МСМ исследований с помощью кантилеверов с магнитными зондами (**Co-Cr**) недопустимо при изучении этих материалов ввиду их низкой собственной намагниченности (~103Гс), что потребовало разработки специальных методик. Сканирование образцов **YFeO3**и **DyFeO3** производилось по стандартным методикам одно- и двух проходной МСМ с помощью специально подготовленного магнитного зонда, обработанного перед установкой в СЗМ низкочастотным переменным магнитным полем с целью снижения его намагниченности, что исключало его воздействие на образцы с высокой магнитной и оптической восприимчивостью. Такая методика позволила впервые визуализировать с наномасштабным разрешением магнитные микроособенности (кинков, бризеров и др.) на статических доменных границах разных типов в **YFeO3** и **DyFeO3** в магнито-силовых исследованиях.

Совместное использование имеющихся высоких пространственного и спектрального разрешений, наряду с разработанными методиками и применением созданных оптических устройств позволили, впервые, визуализировать ДС и тонкую структуру ДГ методом построения карт гиперспектрального распределения КРС с точностью позиционирования образцов в СЗМ – 0.2 Å в заданной области образца с пространственным разрешением меппинга (диаметр пучка лазерного излучения) – 500 нм.

В рамках обзора основных принципов моделирования физических систем рассмотрены методы: классических потенциалов, квантово-механический, Хартри-Фока, полуэмперический, функционала электронной плотности, псевдопотенциала исделан вывод об ихприменимости для анализа магнитных особенностей, неоднородностей и доменных образованийиз первых принципов (*ab-initio*)и расчетов спектров КРС.

**Третья глава**содержит основные полученные результаты по магнитооптическим, магнитно-силовым и спектральным (рамановским) исследованиям.

|  |
| --- |
| D:\Raman\My samples\YFeO3\MSM\Zond2.jpg |
| **Рис. 2.** Конфокальное магнито-оптическое изображение ДС в YFeO3 |

По результатам проведенных МСМ исследований изучены особенности структуры ДГ в пластинчатом образце **YFeO3**, вырезанном перпендикулярно оптической оси, в области явно выраженной магнитной неоднородности (180°-ый поворот ДГ типа head-to-head) (рис. 2).В результате чего были выявлены особые точки (бризеры), в которых соединяются прямолинейные участки ДГ таким образом, что полная конфигурация стенки представлена совокупностью кусочно-линейных участков (рис. 3). Полное изображение МСМ получено путем состыковки трех сканов в поле 100×100 мкм.

|  |
| --- |
| C:\Users\Павел\Desktop\1.jpg |
| **Рис. 3.** МСМ изображения ДГ в области перегиба (head-to-head) |

Такой же анализ, но с более высоким пространственным разрешением в поле сканирования 5×5 мкм, позволил также, впервые, выявить, даже на прямолинейных участках ДГ, наличие магнитных особенностей типа кинк (рис. 4, а). Формирование кинкообразных особенностей на прямолинейной ДГ теоретически было предсказано в работах Звездина А.К. с сотрудниками[3], а их динамическое поведение изучено в работах Чёткина М.В. с сотрудниками [4][5], где причина их возникновения связана с наличием гироскопической силы в магнитных подрешетках, то есть обменными взаимодействиями. Такой вывод подтверждался совпадением предельных скоростей движения кинк-образований с минимальной фазовой скоростью спиновых волн, определенную на линейном участке дисперсии спиновых волн. По данным МСМ возникновение таких образований обусловлено, очевидно, наличием в поверхностных слоях пластинчатых образцов **YFeO3** остаточных механических повреждений, которые неизбежно появляются при их подготовке (ср. рис 4, б). Профили сканирования МСМ в окрестности кинка практически не изменяются, что указывает на отсутствие сколь-нибудь значимого поворота ДГ или изменения ее типа. Обнаружение на статической ДГ образований типа кинк требует пересмотра существующих теоритических представлений и постановки новых динамических экспериментов.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| D:\Raman\My samples\YFeO3\MSM\pict\For article\kink1Phase.jpg  2  1  3 | D:\Raman\My samples\YFeO3\MSM\pict\For article\kink1ASM.jpg | H:\рис\профили.jpg |
| а | б | в |
| **Рис.4.**Изображение участка поверхности образца **YFeO3** в окрестности ДГ: а – МСМ изображение изгиба ДГ типа кинк, б – изображение топографии поверхности, в – магнитные профили в окрестности кинка | | |

Для установления влияния кристаллографической ориентации в СФМ ЛО образцов РЗО МСМ исследования проведены на **DyFeO3**,в котором плоскость образца перпендикулярна оси [001] и возникает влияние многоэлектронных *f*-оболочек. В такой ориентации образцов магнитооптические методыне применимы, так как влияние оптического двулучепреломления существенно уменьшает магнитооптическую добротность, что делает практически значимым применение МСМ методик.Однопроходная методика МСМ позволила выявить отличительные признаки для ДГ Блоха и Нееля, одновременное образование которых является энергетически выгодным для такого типа ориентации. Сканы МСМ для этих типов ДГ существенно различались как по ширине, так и по форме(рис. 5, а и б – левая часть), что согласуется с их расчетными профилями ДГ (рис. 5, а и б – правая часть).

|  |  |
| --- | --- |
| C:\Documents and Settings\Администратор.GEEPNOZEEX\Рабочий стол\11.jpg | C:\Users\Павел\Desktop\2.jpg |
| а | |
| C:\Documents and Settings\Администратор.GEEPNOZEEX\Рабочий стол\12.jpg | C:\Users\Павел\Desktop\2.jpg |
| б | |
| **Рис. 5.** МСМ изображение и «магнитный профиль» ДГ в **DyFeO3**: а – ДГ типа Блоха, б – ДГ типа Нееля | |

Ориентационные зависимости интенсивности КРС для спектральной линии 221 см-1, отвечающей фононным возбуждениям магнитного иона **Fe3+**, в доменах с противоположной намагниченностью обладали явно знакопеременным характером (рис. 6). Максимальное различие интенсивности на этой линии достигает 34±1.5%. Анализ по теории групп корреляции пространственной (*Pnma*) и позиционной () симметрии, соответствующей ромбической сингонии элементарной ячейки **YFeO3**показал, что полное колебательное представление для этого магнитного иона имеет вид: Г = *A*g+*A*u.Фактически, из-заотсутствия вклада в спектр КРС колебания*A*u,колебательное представление сводится только к одному неприводимому представлению –*A*g.

|  |
| --- |
| C:\Documents and Settings\Администратор.GEEPNOZEEX\Рабочий стол\13.jpg |
| **Рис.6.** Угловая зависимость интенсивности спектральной линии 221 см-1. Линии различного типа соответствуют доменам с противоположной намагниченностью |

На основе обнаруженной ориентационной зависимости интенсивности КРС (рис. 6) была разработана методикавизуализации магнитных структур в **YFeO3**методомRaman-Mapping, при совместном использовании рамановского микроспектрометра и СЗМ, когда образец на сканаторе перемещается с нанометровой точностью в поле до 100×100 мкм и формируются гиперспектральныераспределения из 900 спектров (рис. 7). Полученный таким образом магнитный профиль соответствует ДГ типа Нееля и совпал с ее профилем, построенным по методике МСМ (рис 5, б).

|  |
| --- |
| C:\Documents and Settings\Администратор.GEEPNOZEEX\Рабочий стол\14.jpg |
| **Рис.7.** Визуализированная методом картирования ДС в образце **YFeO3** и ее «магнитный профиль» |

Неоднородности немагнитной природы вызывали существенные изменения как формы ДГ (образование кинка, рис. 4, а), так и ее значительное уширение вплоть до 20 мкм, что позволило визуализировать тонкую структуру самой доменной стенки (рис. 8). По гиперспектральнымраспределениям в этом случае была обнаружена в центральной части на карте изменений намагниченности внутри ДГтемная область, образование которой, видимо, связано с нулевой намагниченностью.Такая особенность в тонкой структуре ДГнеелевского типа согласуется с теоретическими выводами [6] и только косвенно подтверждалась по рассеянию нейтронов [7]. Наблюдаемые на рис. 8сферические образованияв области, соответствующей краям ДГ, также как в образце**DyFeO3**на МСМ изображениях (рис. 4, а и б),могут выступать в качестве зародышевых центров формирования дополнительных каналов диссипации энергии движущейся ДГ, которая на сверхзвуковых скоростях становится существенно неодномерной [6].

|  |
| --- |
|  |
| **Рис. 8.** Карта изменений намагниченности внутри ДГ |

Для установления физического механизма,создающего разные интенсивности КРС в доменах с противоположной намагниченностью,учтены оптическое поглощение и магнитооптический эффект Фарадея как возбуждающего, так и рассеянного излучений, диполяризация магнитных ионов при световом воздействии, а также ориентация вектора поляризации падающего излучения. Фокусировкой возбуждающего излучения на разных глубинах образца с помощью пьезопозиционеров АСМ показано, что интенсивность линий в спектре КРС подчиняется закону Ламберта-Бугера-Бера с учетом двойного прохода света до точки фокусировки и обратно в виде рассеянного излучения.Магнитооптическая активность исследуемых СФМ ЛО и ЛП (для **YFeO3** фарадеевское вращениена λ=532 нм θF=3000о/см) вызывает вращение как вектора электрической напряженности рассеянного света на некоторый зеркально-симметричный угол γв доменах с противоположной намагниченностью, так и вектора поляризации падающего излучения. Однако, рассеянная составляющая в соответствии с законом Малюса не вносит измененийв интенсивности КРС от разных доменов.

Для учета наблюдаемых изменений интенсивностей КРС в соседних доменах от падающего излучения введено отношение: , где *W*2 и *W*1 – интенсивности КРС во втором и в первом доменах, которыеопределяются только величинами проекций вектора электрической напряженности возбуждающего излучения на вектор поляризации атомов (Рис. 9). В общем случае антистоксовы компоненты *W*2 и *W*1  выражаются:

, (1)

где *A* – безразмерная константа, ωL и ωk – частоты возбуждающего излучения и собственных колебаний атомов, ε – поляризуемость.

|  |  |
| --- | --- |
| K:\Наши\JMMM 2011\Mechanizm\Fig 2a.jpg | K:\Наши\JMMM 2011\Mechanizm\Fig 2b.jpg |
| **Рис.9.** Векторная диаграмма взаимной ориентации векторов и для доменов с противоположной намагниченностью | |

Максимальное значение результирующей проекции на достигается при равном половине угла γ. Из-за поглощения падающего излучения веществом его мощность падает и ослабевает его действие на вектор поляризуемости, векторы и поворачиваются с разными скоростями в одном направлении в первом домене, а во втором – во взаимно-противоположных направлениях, что и вызывает различие интенсивностей КРС в них. Оценканаблюдаемых изменений интенсивностей КРС в соседних доменах характеризуется отношением*W*2/*W*1:

. (2)

Угол ψ1учитывает изменение степени деполяризации за счет поглощения. Расчет*W*2/*W*1 дал 0.356, что сравнимо с опытно наблюдаемым отличием интенсивностей рассеянного излучения – 0.34. Без учета деполяризации под действием излучениявеличина отношения *W*2/*W*1 составит:, которая подтвержденаизмерением спектров КРС в доменах с противоположной намагниченностью при ослаблении мощности возбуждающего излучения в 10 раз, когдаотношение интенсивностей КРС в соседних доменах составило 0.48. Данный результат косвенно подтверждает правильность выбранной модели.

|  |
| --- |
| D:\Dropbox\YFeO3\Phonon cm-1обрезанный.jpg |
| Рис**.10.** Фононный спектр **YFeO3** в центре зоны бриллюэна |

**В четвертой главе**приведены результаты моделирования физических параметров из первых принципов (*ab-initio*) для**YFeO3**в программнойсредеAccelrys Materials Studio 5.0. Для расчета спектра КРС необходимы промежуточные расчеты плотности электронов иэлектронных состояний, построениезонной структурыи зон Бриллюэна,дисперсионной зависимости дляспектра фононов.

Расчет зонной структуры и плотности электронных состояний показал, что исследуемый материал обладает двумя заполненными зонами которые разделяет запрещенная зона с шириной 11 эВ, что соответствует диэлектрической природе**YFeO3**и подтверждает корректность расчетов.

Анализ рассчитанной дисперсионной зависимости фононного спектра в центре первой зоны Бриллюэна (рис. 10) позволяет получить фононные возбуждения, которые совпадают с опытно наблюдаемыми в спектре КРС (Рис. 11). В частности это спектральные линии 186, 221, 281, 344 и 431 см-1. Стоит отметить, что акустическими колебаниями, из перечисленных, являются только 186 (LA) и 221 см-1 (TA), остальные же относятся к оптическим фононным колебаниям.

Расчет спектра КРС производился без учета спиновой поляризации методом «Оптимизация геометрии», в котором геометрия атомной конфигурации и параметры решетки итерационно изменялись до тех пор, пока силы и напряжения, действующие в ячейке, не достигнут нижнего заданного значения (10–10эВ). Моделировалосьтакже поведения кристаллической структуры **YFeO3** при задаваемых внешних напряжениях и давлениях. Методом итерацийстроилось уравнение состояния, а расчеты проводились в зависимости от значения внешнего давления.Выполнены расчеты линий в спектре КРС для атмосферного давления 10-4 ГПа. Для оптимизации геометрии использовался алгоритм Бройдена-Флетчера-Гольдфаба-Шенно (BFGS), в котором координаты атомов и параметры решетки рассматриваются как равноправный набор.

Сравнительный анализ рассчитанного спектра КРС (от 0 до 600 см-1) и измеренного экспериментально (рис. 10) хорошо совпадают. При этом, так как в AMS расчет свойств и параметров моделируемого объекта производятся последовательно и вычисление спектра КРС находится в конце цепочки, то совпадение расчётных и экспериментальных данных косвенно подтверждает и справедливость промежуточных результатов (плотность электронов, зона Бриллюэна, фононный спектр, зонная структура и распределение плотности электронных состояний).

|  |
| --- |
| E:\Dropbox\рисунки\Без имени-2.jpg |
| **Рис.11.** Сравнительный анализ расчетного и измеренного спектров КРС **YFeO3**.Прерывистыми линиями показаны рассчитанные спектральные пики |

Представлено описание на поданную заявку на патент «Рамановский (комбинационное рассеяние света) экспресс анализ состава минеральных включений в обогащаемых концентратах добывающих предприятий» доказана практическая важность экспресс анализа состава и химической структуры минеральных включений в обогащаемых концентратах добывающих предприятий, основанный на раман (комбинационном) рассеянии света, позволяющего однозначно и с высокой локальной пространственной точностью (до 0.5 мкм) за время экспозиции, составляющем несколько десятков секунд, без специального приготовления поверхностей, непосредственно в обогатительном производстве, а также количественного определения объема железосодержащих минеральных включений с точностью 0.5 % за время сопоставимое с отдельными технологическими операциями (30 мин), что позволяет реализовывать схемы оперативного управления технологическими процессами обогащения.

**Основные результаты и выводы:**

1. Создано устройство, встраиваемое в систему ввода-вывода излучения рамановского конфокального микроспектрометра, для прецизионного позиционирования образцов.
2. Проведены магнитоптические исследования магнитных неоднородностей и доменных образований в прозрачном слабом ферромагнетике **YFeO3**с пространственным разрешением ~ 500 нм. Получены изображения прямолинейного участка доменной стенки (Δ=2.5 мкм) и участка, содержащего бризер (Δ1=8.3 мкм и Δ2=21.2 мкм)..
3. Создано оптическое устройство, позволяющее производить магнитооптические исследования непосредственно вовремя работы СЗМ.
4. Проведены наномасштабные магнитно-силовые исследования доменной структуры в пластинчатых прозрачных образцах **YFeO3**и **DyFeO3**с пространственным разрешением не хуже 40 нм. Обнаружены микромагнитные особенности доменных границ (кинки и бризеры). В качестве возможной причины образования кинков на статической доменной границе предложено взаимодействие последней с дефектами поверхности, вызванными процессом подготовки образца. Обнаружены сферические образования (диаметр 1– 2 мкм) на доменных стенках, выступающие в качестве зародышевых центров формирования дополнительных каналов диссипации энергии движущейся доменной границы. Измерены характерные ширины доменных стенок на их прямолинейных участках: для доменной стенки неелевского типа – 3 мкм, блоховского – 0.7 мкм.
5. Разработана методика визуализизации доменной структуры и тонкой структуры доменной стенки с помощью конфокального рамановкого микроспектрометра с пространсвенное и спектральным разрешением ~500 нм и 0.8 см-1, соответственно. Установлено хорошее согласие полученных таким способом данных с результатами магнитно-силовой микроскопии.
6. Предложена полуколичественная модель формирования гипреспектрального распределения интенсивности комбинационного рассеяния света в доменах с противоположной намагниченностью. Получено удовлетворительное согласие с опытными данными величины этого эффекта в различных предельных случаях: 1) 35.6% и 34%, 2) 50% и 48%.
7. Проведен расчет физических параметров (плотности электронов и электронных состояний, построение зонной структуры и зон Бриллюэна, дисперсионной зависимости для спектра фононов и раман-спектров **YFeO3**)из первых принципов (*ab-initio*) до 600 см-1 при различных условиях. Получено хорошее согласие с данными, полученными опытным путем.

# Список цитируемой литературы

1. Звездин А.К., Логгинов А.С., Мешков Г.А., Пятаков А.П. *Мультиферроики: перспективные материалы микроэлектроники, спинтроники и сенсорной техники* // Известия РАН. Физическая серия. — №71., Выпуск 11. — 2007. — c. 1604 – 1605

2. Козаков А.Т., Гуглев К.А., Илясов В.В. и др. *Электронне строение монокристаллических феррита висмуа и гематита: рентгеноэлектронное исследование и расчет* // ФТТ. — №53., Выпуск 1. — 2011. — c. 41 - 47

3. Звездин А.К. *О динамике доменных границ в слабых ферромагнетиках* // Письма в ЖЭТФ. — №29., Выпуск 10. — 1979. — c. 605 – 610

4. Чёткин М. В., Курбатова Ю. Н., Шапаева Т. Б., Борщеговский О. А. *Отражение антиферромагнитных вихрей на сверх-звуковой доменной границе в ортоферрите иттрия* // Письма в ЖЭТФ. — №85., Выпуск 4. — 2007. — c. 232 – 235

5. Bar’yakhtar V.G., Chetkin M.V., Ivanov B.A., Gadetskii S.N. *Dynamics of Topological Magnetic Solitons, Experiment and Theory* — Berlin: Springer-Verlag, Springer Tracts in Modern Physics, 1994. — 179 c.

6. Фарзтдинов М.М., Шамсутдинов М.А., Халфина А.А. *Струк-тура доменных границ в ортоферритах* // ФТТ. — №11., Выпуск 8. — 1979. — c. 404 - 406

7. Takahashi J., Matsubara E., Arima T., Hanamura E. *Coherent multistep anti-Stokes and stimulated Raman scattering associated with third harmonics in YFeO3 crystals* // Phys. Rev. B. — №68. — 2003. — c. 155102-1 – 155102-5

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

**Статьи в рецензируемых научных журналах и изданиях:**

1. Кузьменко, А.П., Тонкая структура доменной границы в ортоферрите иттрия по данным комбинационного рассеяния света  / Кузьменко А.П., Абакумов П.В., Чаплыгин А.Н.// Известия Курского государственного технического университета. 2010. №4(33). С. 11 – 17.
2. Kuz’menko, A.P., Raman imaging of Domains Fine Structure of Domain Walls in YFeO3 Crystals / Kuz’menko A.P.,Abakumov P.V. // Technical Physics Letters, 2011. Vol.37, No. 11. pp. 1058 – 1061.
3. Kuzmenko, A.P., Domain wall structure of weak ferromagnets according Raman / Kuzmenko A.P.,Abakumov P.V., Dobromyslov M.B. // JMMM. 2012. Vol. 324, pp. 1262 – 1264.

**Статьи в сборниках докладов и материалах конференций:**

1. Абакумов,П.В. Особенности рамановского рассеяния света в магнитоупорядоченных средах  /  АбакумовП.В.,Кузьменко А.П. // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы IX региональной научной конференции, Хабаровск, 14 – 16 октября 2010 г. – Хабаровск: Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2010. С. 23 – 26.
2. Кузьменко, А.П., Комбинационное рассеяние света для микроанализа доменной структуры в магнитоупорядоченных материалах / Кузьменко А.П., Абакумов П.В // «Нанотехнологии производству 2010», Тезисы докладов VII Международной научно-практической конференции. 1 – 3 декабря 2010 г. Фрязино. С. 57 – 62.
3. Кузьменко, А.П. Наномасштабная рамановская спектроскопия магнитных структур / Кузьменко А.П., Абакумов П.В. // Перспективные технологи, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов: тр.VIII Междунар. Конф. / редкол.: Л.В. Кожитов Л.В (отв. Ред.) [и др.]; ЮЗГУ, НИТУ «МИСИС» [и др.]; Курск, 2011. С. 564 – 572.
4. Кузьменко, А.П. Микроспектральные и наноструктурные особенности в материалах с магнитным упорядочением / Кузьменко А.П., Абакумов П.В. // Современные инструментальные методы, информационные технологии и инновации: матер. VIII межд. науч. конф. в 2 ч., Ч.2 /редк.: Е.И. Яцун (отв. ред.) [и др.]. Юго-Зап. гос. ун-т. Курск. 2011. С. 238 – 249.
5. Kuz’menko, A.P.RamanimageofthemagneticstructureYFeO3 / Kuz’menkoA.P., AbakumovP.V. // SpinWaves 2011InternationalSymposium. June 5 – 11. C. 108.

Подписано в печать \_\_\_\_\_\_.\_\_\_\_\_\_\_.2012г. Формат 60×84/16. Печать офсетная.

Печ.л. 1 . Тираж 100 экз. Заказ \_\_\_\_\_.

Юго-Западный государственный университет.

305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94