

УДК 537.622.4

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ 2D-МАГНЕТИКА НА ПОДЛОЖКЕ

© 2024 г. И. В. Мальцев¹*, И. А. Кузнецов¹, И. В. Бычков¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет», Челябинск, Россия

*E-mail: malts_iv@mail.ru

Поступила в редакцию 02.05.2024

После доработки 13.05.2024

Принята к публикации 31.05.2024

Изучено влияние температуры, внешнего магнитного поля и немагнитной подложки на двумерный магнетик со скирмионной структурой. Исследование выполнено с помощью Монте-Карло моделирования. Скирмионная структура обеспечивалась наличием взаимодействия Дзялошинского–Мория и анизотропии в энергии системы. Влияние подложки описывалось потенциалом Френкеля–Конторовой.

Ключевые слова: ферромагнитная плёнка, потенциал Френкеля–Конторовой, скирмион, Монте–Карло моделирование

DOI: 10.31857/S0367676524090043, EDN: OEKHGT

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию свойств наноструктур на основе 2D-магнитных материалов обусловлен широкой перспективой их применения в качестве электронных устройств спинтроники. 2D-магнетики делают возможным создание нового типа энергонезависимой памяти с более высокой плотностью записи. В качестве единицы информации в такой памяти могут выступать топологически защищенные вихреобразные спиновые структуры – скирмионы.

Кроме топологической устойчивости скирмионов, к их достоинствам можно отнести возможность управления посредством спин-поляризованного тока очень малой плотности [1, 2], что положительно отражается на энергопотреблении устройств. Способы получения одиночных скирмионов нанометрового масштаба исследовались в работах [1–8], формирование скирмионных кристаллов [9–12], движение скирмионов индуцируемое спин-поляризованным током [1, 3, 4, 13], а также способы детектирования [14, 15] и удаления [16] скирмионов.

Одним из механизмов образования скирмионов является наличие антисимметричного взаимодействия Дзялошинского–Мория [17, 18], которое конкурирует с обменным взаимодействием. В работе [19] показана возможность управления взаимодействием Дзялошинского–Мория, и соответственно динамикой скирмионов, с помощью электрического поля. А в работе [24] экспериментально показано влияние

магнитного поля на положение и размеры скирмионов в тонких пленках CoPt. Условия формирования скирмионной решетки в тонкой пленке, состоящей из антиферромагнитного и сегнетоэлектрического слоев, исследовалось в работе [25].

Одними из многих материалов, в которых возможно образование магнитных скирмионов, являются кубические нецентросимметричные магнетики. В них может присутствовать неколлинеарные спиновые конфигурации, которые могут состоять из одной или нескольких спиралей, тем самым образуя скирмионы. MnSi со структурой B20 является примером геликоидального магнетика. В экспериментальной работе по рассеянию нейтронов [20] в MnSi получена двумерная скирмионная фаза, которая может быть представлена как гибридное состояние, состоящее из трех спиралей с волновыми векторами, формирующими между собой угол 120°.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В работе использована 3D-модель Гейзенберга на квадратной решетке. Взаимодействие Дзялошинского–Мория лежит в плоскости (x, y) для получения геликоидальной конфигурации спинов, внешнее магнитное поле приложено вдоль оси z . Гамильтониан такой модели будет выглядеть [21]:

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_{i,j} \cdot (\vec{S}_{i,j+1} + \vec{S}_{i+1,j}) - \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
 & - D \sum_{i,j} \left(\left(\vec{S}_{i,j} \times \vec{S}_{i,j+1} \right)_x + \left(\vec{S}_{i,j} \times \vec{S}_{i+1,j} \right)_y \right) + \\
 & A_1 \sum_{i,j} \left(\left(S_{i,j}^x \right)^4 + \left(S_{i,j}^y \right)^4 + \left(S_{i,j}^z \right)^4 \right) - \\
 & - A_2 \sum_{i,j} \left(S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i+1,j}^y \right) - h \sum_{i,j} S_{i,j}^z,
 \end{aligned}$$

где J – обменный интеграл ферромагнитного взаимодействия, в данной работе мы приняли $J = 1$, D – взаимодействие Дзялошинского–Мория, A_1 и A_2 – постоянные анизотропии (в данной работе мы приняли $A_1 = 0.5$), h – внешнее магнитное поле. Моделирование выполнялось на решетке размером 18×18 , поэтому отношение D/J было выбрано равным $\sqrt{6}$, что дает значение волнового вектора $k = 2\pi/6$, позволяющее разместить несколько периодов спирали. Для упрощения моделирования, постоянная решетки, как и постоянная Больцмана были выбраны равными единице. При моделировании был использован стандартный алгоритм Метрополиса. Первые $2 \cdot 10^6$ МК шагов на спин для каждой температуры отбрасывались, термодинамические параметры рассчитывались в течении следующих $2 \cdot 10^6$ МК шагов на спин.

Анализ полученных конфигураций магнитной системы был выполнен с помощью Фурье-преобразования $\langle \vec{S}_k^- \rangle = \sum_{\vec{r}} \langle \vec{S}_{\vec{r}}^- \rangle e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ усредненной спиновой конфигурации $\langle \vec{S}_{\vec{r}}^- \rangle$. Для определения типа полученной конфигурации строился профиль интенсивностей $\left| \langle \vec{S}_k^- \rangle \right|^2$ в плоскости (k_x, k_y) .

Варьируя параметры анизотропии и внешнего поля, можно добиться нескольких видов спиновых конфигураций. Фазовая диаграмма данной системы получена в работе [21]. В данной работе исследовались 3 скирмионные фазы с параметрами $(A_2, h) = (2, 0)$ – фаза SC_1 , $(3, 0)$ – фаза SC_2 , $(1, 2)$ – фаза SC_h , имеющие различные спиновые конфигурации и профили интенсивностей, которые изображены на рис. 1 (при $T = 0.01$).

Фаза SC_1 и SC_2 образуются в результате суперпозиции двух спиновых спиралей, о чем наглядно свидетельствует их профиль интенсивности. При этом видно, что интенсивность одной из спиралей в SC_1 заметно меньше другой. Фаза SC_h промодулирована в трех направлениях, отстоящих друг от друга на 120° . Профиль интенсивности для фазы SC_h имеет шестиугольную форму.

Для исследования влияние магнитного поля на магнитную структуру системы рассчитывалась локальная хиральность по формуле

$$8\pi\chi_{i,j} = \vec{S}_{i,j} \cdot \left(\left(\vec{S}_{i,j+1} \times \vec{S}_{i+1,j} \right) + \left(\vec{S}_{i,j-1} \times \vec{S}_{i-1,j} \right) \right) \quad (2)$$

Изменение локальной хиральности при увеличении магнитного поля схематически обозначено на рис. 2. При $h = 0$ для фаз SC_1 и SC_2 отчетливо видны области формирования скирмионов (светлые участки) и антискирмионов (темные участки). С увеличением магнитного поля периодическая структура разрушается и появляются одиночные скирмионы. При низком значении анизотропии A_2 и в отсутствии поля h система находится в фазе $S\bar{S}$ со спиральным упорядочением спинов в плоскости (x, y) . С повышением магнитного поля спиральная фаза переходит в скирмионную SC_h , но при дальнейшем увеличении поля одиночные скирмионы не появляются.

Влияние температуры на спиновую структуру можно исследовать с помощью определения параметра порядка, что непросто сделать для неколлинеарного расположения спинов [10]. Для этого необходимо провести сравнение спиновой конфигурации $\vec{S}_{\vec{r}}$ при температуре T на каждом шаге моделирования с основным состоянием системы. Далее нужно провести усреднение по всем шагам и по всем спинам. Таким образом, параметр порядка Q определяется аналогично параметру порядка Эдварда–Андерсона для спиновых стекол [22]:

$$Q(T) = \frac{1}{L^2 n_{\text{шаг}}} \sum_{\vec{r}} \sum_{n_{\text{шаг}}} \vec{S}_{\vec{r}}(T) \cdot \vec{S}_{\vec{r}}^0, \quad (3)$$

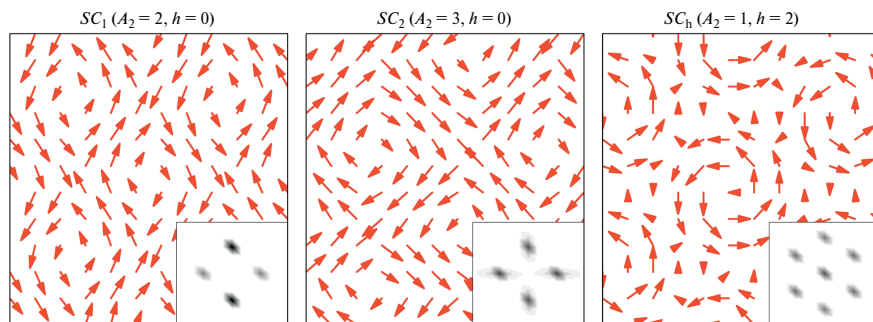


Рис. 1. Спиновая конфигурация и профиль интенсивностей для скирмионных фаз при низкой температуре ($T = 0.01$). Стрелками обозначены направления спинов в плоскости $X\bar{Y}$.

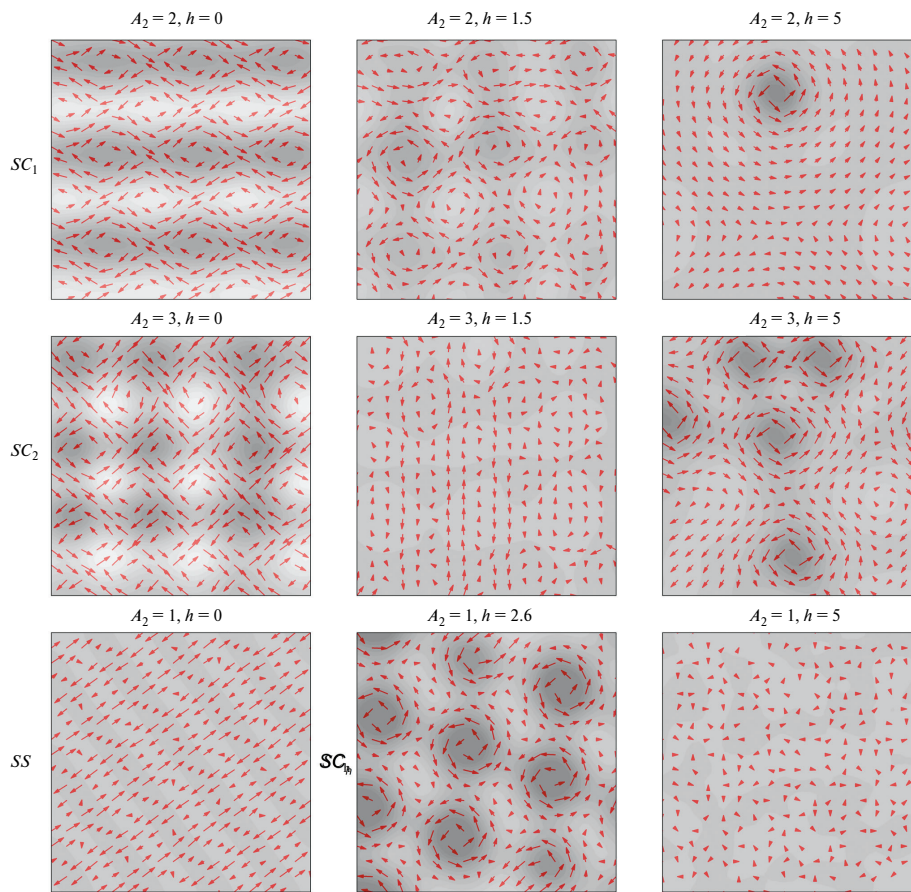


Рис. 2. Изменение магнитной структуры фаз SC_1 , SC_2 , SS под действием магнитного поля. Темными и светлыми участками обозначены значения локальной хиральности χ_{ij} . Стрелками обозначены направления спинов в плоскости XU .

где $\vec{S}_F(T)$ – конфигурация магнитной системы при температуре T для каждого шага Монте–Карло, $n_{\text{шаг}}$ – общее количество шагов Монте–Карло, L – размер решетки, \vec{S}_F^0 – основное состояние магнитной системы. При таком определении параметр порядка $Q(T)$ будет близок к единице, когда все спины в текущей конфигурации слабо отклоняются от основного состояния, а при переходе в парамагнитную фазу $Q(T)$ будет близок к нулю.

Далее необходимо рассмотреть вопрос о том, является ли скирмионная фаза основным состоянием исследуемой системы. Для этого были рассчитаны конфигурации магнитной системы для трех скирмионных фаз при нулевой температуре с помощью алгоритма Метрополиса. Расчет подтвердил, что основным состоянием системы при параметрах $(A_2, h) = (2, 0)$ и $(3, 0)$ действительно является скирмионная фаза, состоящая из двух спиновых спиралей. Однако для значений $(A_2, h) = (1, 2)$ этого сделать не удалось.

Обращая внимание на то, что здесь было важно исследовать процесс разрушения скирмионной фазы, в качестве основного состояния были

рассмотрены также конфигурации, полученные иным способом.

Так как основным показателем, определяющим тип спиновой конфигурации, стал профиль интенсивностей $\left\langle \left| \vec{S}_k \right|^2 \right\rangle$, то и факт перехода из одной фазы к другой можно отследить по изменению этого профиля. Поэтому в качестве основного состояния можно взять такие спиновые конфигурации, которые соответствовали бы профилям интенсивностей для скирмионной фазы. Чтобы получить такие конфигурации, профили интенсивностей, полученные при $T = 0.01$ были очищены от всех примесей, то есть были оставлены только основные пики. Далее с помощью обратного Фурье-преобразования получены требуемые конфигурации. Они и были приняты в качестве основного состояния при расчете зависимости $Q(T)$ на рис. 3.

По зависимости $Q(T)$ для фазы SC_1 можно сделать вывод о том, что переход в парамагнитную фазу осуществлялся в 2 этапа. Рассмотрение зависимости $Q(T)$ отдельно для каждой компоненты говорит о том, что при $T < 0.1$ фаза SC_1 сохраняется,

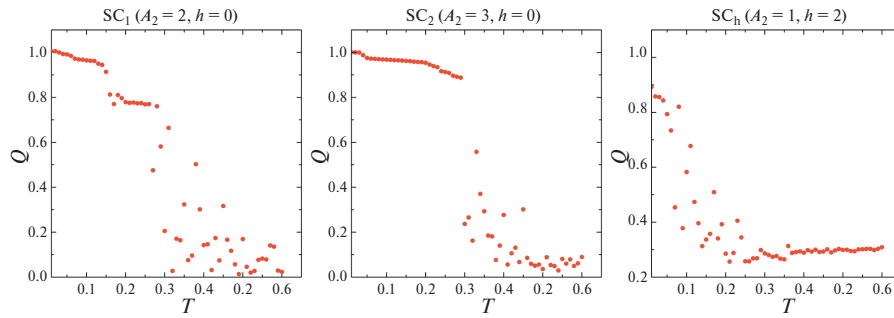


Рис. 3. Зависимость параметра порядка $Q(T)$ для скирмионных фаз SC_1 , SC_2 , SC_h .

в промежутке от 0.1 до 0.2 пропадает упорядочение по оси x . При $T > 0.3$ начинает пропадать порядок и по оси y . При этой же температуре начинает разрушаться фаза SC_2 . Фаза SC_h начинает разрушаться еще при температуре $T < 0.1$ и к $T \approx 0.3$ переходит в ферромагнитную фазу.

УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ПОДЛОЖКИ

Также было исследовано влияние подложки на магнитную систему, которое проявляется через взаимодействие атомов 2D-магнетика и подложки. Влияние атомов подложки на геометрическое положение атомов 2D-магнетика моделируется с помощью двумерного потенциала Френкеля–Конторовой [23] с периодически расположенными потенциальными ямами:

$$U_{\text{sub}} = \frac{\alpha_{\text{FK}}}{2} \left(2 - \cos\left(\frac{2\pi x}{b_x}\right) - \cos\left(\frac{2\pi y}{b_y}\right) \right), \quad (4)$$

где x, y – координаты на поверхности подложки, b_x и b_y периоды потенциала подложки вдоль осей x и y соответственно, а α_{FK} – амплитуда этого потенциала.

Упругое взаимодействие между атомами 2D-магнетика описывается в гармоническом приближении.

$$U_{\text{el}} = \frac{g}{2} \sum_{n,m} \left((x_{n+1,m} - x_{n,m} - a)^2 + (y_{n,m+1} - y_{n,m} - a)^2 \right), \quad (5)$$

где g – упругая постоянная, $(x_{n,m}, y_{n,m})$ координаты (n, m) атома, a – постоянная решетки магнетика.

Влияние подложки на магнитную систему проявлялось через зависимость обменного интеграла от расстояния между атомами магнетика.

$$J(r_{ij}) = J_0 e^{\left(-|r_{ij}-a|/r_0\right)}, \quad (6)$$

где J_0 – обменный интеграл недеформированной ФМ пленки. Параметр r_0 определяет степень убывания обменного интеграла с расстоянием и зависит от вещества пленки. В данной работе $r_0 = 0.1$, соотношение $\alpha_{\text{FK}}/g = 0.002$.

Перед началом исследования магнитной структуры находилось равновесное положение атомов магнетика при помощи метода последовательных итераций. В качестве одной итерации выступало пробное смещение каждого атома на случайный вектор. Если новое положение атома уменьшало потенциальную энергию системы ($U_{\text{sub}} + U_{\text{el}}$), то оно принималось. При достижении минимума потенциальной энергии проход по всем атомам не меняет их положения, и итерационный процесс останавливается.

Влияние потенциала подложки на температурную эволюцию спиновых конфигураций показано на рис. 4. Тут изображена зависимость параметра порядка от температуры для фаз SC_1 и SC_2 . На графике для SC_1 можно заметить, что при наличии подложки скирмионная структура начинает разрушаться при $T > 0.2$ не переходя в состояние с одной спиновой спиралью.

При этом, в случае если период потенциала больше постоянной решетки магнетика, скирмионная структура начинает разрушаться раньше. Для фазы SC_2 существенного влияния потенциала подложки на спиновые конфигурации замечено не было.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследования были выделены несколько скирмионных фаз с различной структурой, исследовано влияние на них температуры и внешнего магнитного поля. Влияние магнитного поля проявлялось в нарушении периодичной магнитной структуры и образовании одиночных скирмионов с последующим переходом в ферромагнитную фазу.

При повышении температуры скирмионная структура разрушалась, а процесс разрушения различался для каждой фазы.

Было проведено исследование влияния немагнитной подложки на структуру 2D-магнетика. Подложка моделировалась путем введения в энергию системы двумерного потенциала Френкеля–Конторовой с периодом, близким к постоянной решетки магнетика. Результатом стало разрушение

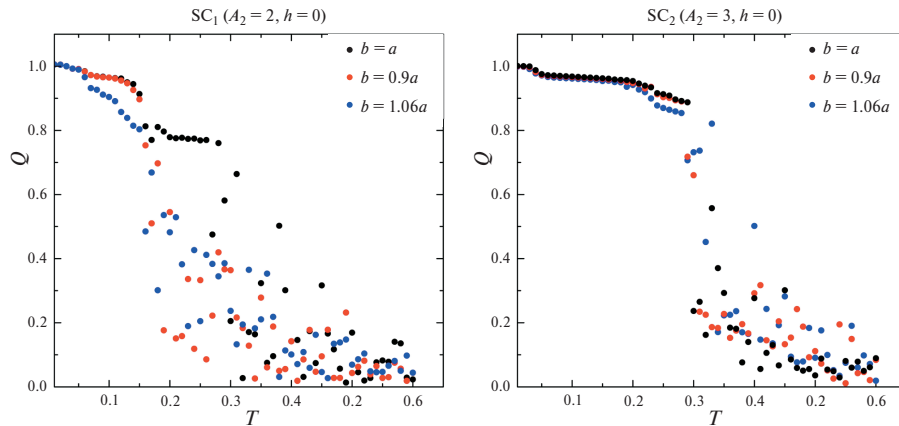


Рис. 4. Зависимость $Q(T)$ при различных значениях периода потенциала подложки b ($\alpha_{\text{FK}}/g = 0.002$).

скирмионной структуры при более низких температурах (для периода потенциала больше постоянной решетки) и исчезновение перехода из скирмионной фазы, состоящей из двух спиралей в фазу, состоящую из одной спирали.

Разработка Монте–Карло модели выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00355); численные расчеты выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения темы государственного задания № 075-00992-24-00.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Iwasaki J., Mochizuki M., Nagaosa N. // Nature Nanotech. 2013. V. 8. P. 742.
- Boulle O., Vogel J., Yang H. et al. // Nature Nanotech. 2017. V. 12. P. 830.
- Sampaio J., Cros V., Rohart S. et al. // Nature Nanotech. 2013. V. 8. P. 839.
- Woo S., Litzius K., Krüger B. et al. // Nature Mater. 2016. V. 15. P. 501.
- Yu G., Jenkins A., Ma X. et al. // Nano Lett. 2018. V. 18. No. 2. P. 980.
- Rana K.G., Finco A., Fabre F. et al. // Phys. Rev. Appl. 2020. V. 13. Art. No. 044079.
- Guang Y., Bykova I., Liu Y. et al. // Nature Commun. 2020. V. 11. P. 949.
- Moreau-Luchaire C., Moutafis C., Reyren N. et al. // Nature Nanotechnol. 2016. V. 11. P. 444.
- Sun L., Cao R.X., Miao B.F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 167201.
- Sharafullin I.F., Diep H.T. // Symmetry. 2020. V. 12. No. 1. Art. No. 26.
- Hog S.E., Sharafullin I.F., Diep H. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2022. V. 563. P. 169920.
- Hu X.C., Wu H.T., Wang X.R. // Nanoscale. 2022. V. 14. P. 7516.
- Emori S., Bauer U., Ahn S.M. et al. // Nature Mater. 2013. V. 12. P. 611.
- Hanneken C., Otte F., Kubetzka A. et al. // Nature Nanotechnol. 2015. V. 10. P. 1039.
- Hamamoto K., Ezawa E., Nagaosa N. // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. No. 11. P. 112401.
- Romming N., Hanneken C., Menzel M. et al. // Science. 2013. V. 341. No. 6146. P. 636.
- Dzyaloshinskii I. // J. Phys. Chem. Solids. 1958. V. 4. No. 4. P. 241.
- Moriya T. // Phys. Rev. 1960. V. 120. P. 91.
- Dai B., Wu D., Razavi S.A. et al. // Sci. Adv. 2023. V. 9. No. 7. Art. No. eade6836.
- Mühlbauer S., Binz B., Jonietz F. et al. // Science. 2009. V. 323. P. 915.
- Yi S.D., Onoda S., Nagaosa N. et al. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. Art. No. 054416.
- Edwards S.F., Anderson P.W. // J. Physics F. Met. Phys. 1975. V. 5. No. 5. P. 965.
- Frenkel Y., Kontorova T. // Acad. Sci. USSR J. Phys. 1939. V. 1. P. 137.
- Темирязев А.Г., Здоровейщев А.В., Темирязева М.П. // Изв. РАН. Сер. физ. 2023. Т. 87. № 3. С. 368; Temiryazev A.G., Zdoroveishchev A.V., Temiryazeva M.P. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2023. V. 87. No. 3. P. 318.
- Шарафуллин И.Ф., Нугуманов А.Г., Баишева А.Х. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2023. Т. 87. № 4. С. 511; Sharafullin I.F., Nugumanov A.G., Baisheva A.H. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2023. V. 87. No. 4. P. 443.

Effect of magnetic field and temperature on the structure of a two-dimensional magnetic on a substrate

I. V. Maltsev^{1, *}, I. A. Kuznetsov¹, I. V. Bychkov¹

¹*Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, 454001, Russia*

**e-mail: malts_iv@mail.ru*

We presented a study of the influence of temperature, external magnetic field, and non-magnetic substrate on a two-dimensional magnet with a skyrmion structure. The study was conducted using Monte Carlo simulation. The skyrmion structure was ensured by the presence of the Dzyaloshinsky-Moriya interaction and anisotropy in the energy of the system. The effect of the substrate was described by the Frenkel-Kontorova potential.

Keywords: ferromagnetic thin film, Frenkel-Kontorova potential, skyrmions, Monte-Carlo simulation