Ж. нано- електрон. фіз./ J. Nano- Electron. Phys. 2009. – Т.1, №1. – С. 19-28

PACS numbers: 05.10.Ln; 75.50.Tt; 75.75. + a; 75.60. - d

# ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

## А.Ю. Поляков, Т.В. Лютый, А.В. Рот-Серов

Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007, Сумы, Украина E-mail: <u>alexander.p87@mail.ru</u>

В данной работе представлены результаты численных исследований, цель которых выяснить влияние температуры, радиуса ядра и константы обменного взаимодействия в пограничном слое на коэрцитивную силу и обменное поле в двумерной спиновой системе типа ядро-оболочка. Установлено, что при увеличении температуры происходит разрушение ферромагнитного упорядочения ядра, что приводит к исчезновению коэрцитивной силы и уменьшению обменного поля смещения. В работе показано, что при увеличении радиуса ядра коэрцитивная сила растет, однако обменное поле смещения показывает немонотонную зависимость от радиуса ядра. Поле смещения по абсолютному значению растет при увеличении константы обменного взаимодействия в пограничном слое, а коэрцитивная сила уменьшается.

Ключевые слова: ДВУМЕРНЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ, НАНОЧАСТИЦА С ПОКРЫТИЕМ, КОЭРЦИТИВНАЯ СИЛА, ОБМЕННОЕ ПОЛЕ СМЕЩЕНИЯ, МАГНИТНЫЙ ГИСТЕРЕЗИС.

(Получено 27.06.2009, в отредактированной форме – 11.07.2009)

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение свойств магнитных нанообъектов в настоящее время является приоритетной задачей, которая ставится перед наукой современным уровнем развития технологии. Причиной этого является обширная область применения таких объектов, например для записи информации [1], датчиков магнитного поля [2] изготовления сильных постоянных магнитов, получения ферромагнитной жидкости [3] и т.д. Так же стимулом к их изучению есть стремление к более глубокому пониманию процессов магнетизма на наноуровне.

Одним из примеров применения магнитных наночастиц в IT-индустрии является магниторезистивная оперативная память [2, 4], или так называемая MRAM (magnetoresistive random-access memory). Последняя является наиболее перспективной разновидностью энергонезависимой памяти, которая использует направление магнитного момента для хранения информации. Ячейка такой памяти представляет собой магнитную наночастицу с комплексным строением. Она состоит из фиксированного магнитного слоя (однородного ферромагнитного участка, намагниченность которого постоянна), туннельного магнитного перехода и свободного магнитного слоя (однородного ферромагнитного участка, намагниченность которого может изменяться под действием внешнего магнитного поля). Туннельный магнитный переход представляет собой тонкий слой диэлектрика. Электрическое сопротивление ячейки сильно зависит от взаимной ориентации намагниченностей в свободном и фикси-рованном слоях. Это является следствием эффекта туннельного магнитосопротивления (см. например [5]). Т.о., измеряя электрическое сопротив-ление такой ячейки, можно осуществить считывание информации. Перезапись осуществляется изменением направления магнитного момента свободного слоя [6].

Другим важным с практической точки зрения примером магнитных наночастиц есть сложные частицы, состоящие из ферромагнитного (FM) ядра и антиферромагнитной (AFM) оболочки. Применение такого рода частиц позволяет решить одну из проблем, являющихся следствием миниатюризации IT-устройств и связанного с ним уменьшения размеров самих частиц, а именно – возрастающее влияние тепловых флуктуаций на магнитный момент [7, 8]. Одним из способов получения таких структур является окисление малых ферромагнитных частиц. При помещении их в атмосферу они легко покрываются слоем оксида, который является антиферромагнетиком. Для предотвращения их полного окисления используют среду с контролируемым содержанием кислорода [9].

Ансамбли таких наночастиц имеют большие перспективы применения в так называемых магнитных накопителях с перпендикулярной записью, рабочая поверхность которых представляет собой текстуру (perpendicular patterned media или bit-patterned media) [10, 11]. В распространенных в настоящее время жестких дисках информация кодируется определенным направлением намагниченности доменов, лежащих в плоскости рабочей поверхности. В отличие от этого в указанных устройствах каждый бит информации будет связан только с одной частицей, магнитный момент которой может быть направлен только в одном из двух направлений, перпендикулярных плоскости распределения частиц. Это позволяет существенно повысить плотность записи информации. Уже в настоящее время на рынке появляются жесткие диски с перпендикулярной записью. Так, известная компания Hitachi не так давно анонсировала начало серийного производства устройств емкостью 1 Тбайт [12]. Прогнозируемая же плотность записи накопителей с перпендикулярной записью ~ 100 Тбит/дюйм<sup>2</sup>.

В частицах с комплексной структурой по типу ядро-оболочка имеет место такое явление, как однонаправленная анизотропия [13], которая является следствием взаимодействия между спинами ферромагнитного ядра и антиферромагнитной оболочки. Одним из проявлений такого взаимодействия является продольное смещение петли гистерезиса, описывающее поведение комплексных магнитных наночастиц во внешнем поле. Это смещение еще называют обменным (exchange bias).

Несмотря на то, что явление обменного смещения было открыто более 50 лет назад [14], его интенсивное изучение ведется именно в настоящее время, что связано с развитием и совершенствованием технологий производства магнитных наночастиц. Наряду с экспериментальными исследованиями [7] широкое распространение приобрело численное моделирование [15-23], основанное на методах Монте-Карло [24, 25].

### 2. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Для моделирования магнитных свойств комплексной наночастицы каждому образующему ее атому ставится в соответствие вектор магнитного момента  $S_i$ , который полагается постоянным по модулю, а его направление задается непрерывным множеством значений полярного угла  $\varphi \in (0; 2\pi)$ . Такие магнитные моменты еще называются спиновыми и располагаются по узлам кристаллической решетки. Принимая во внимание ограниченные вычислительные возможности, ограничимся рассмотрением двумерной квадратной решетки атомов. Рассмотрим участок такой решетки, ограниченный окружностью радиуса  $R + \Delta R$ . Векторы  $S_i$  взаимодействуют друг с другом посредством обменного взаимодействия. Взаимодействие внутри окружности радиуса R является ферромагнитным и характеризуется константой обменного взаимодействия  $J_C$ , а в кольце – внутренним радиусом R и толщиной  $\Delta R$  – антиферромагнитным с константой  $J_S$ . Взаимодействие пограничных спинов ядра с оболочкой характеризуется константой  $J_{If}$ .

Для такой системы можно записать гамильтониан, приведённый к константе [14]:

$$\frac{H}{k_{\rm B}} = -J_C \sum_{\langle i,j \in C \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K_C \sum_{i \in C} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_i\right)^2 - J_S \sum_{\langle i,j \in C \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K_S \sum_{i \in S} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_i\right)^2 - J_{If} \sum_{\langle i \in C, j \in S \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{h} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i ,$$
(1)

где H – полная энергия системы,  $k_{\rm B}$  – константа Больцмана,  $K_C$  и  $K_S$  – константы анизотропии ядра и оболочки, **h** – внешнее магнитное поле. Суммирование в первом, втором и третьем слагаемых выражения (1) ведётся для магнитных моментов ферромагнитного ядра, в четвёртом – для магнитных моментов антиферромагнитной оболочки, в пятом – по пограничным магнитным моментам, в шестом – по всем спинам частицы. Угловые скобки обозначают суммирование по ближайшим соседям.

Рассмотрим случай, когда ось легкого намагничивания ядра совпадает с аналогичной осью оболочки. Примем, что константы анизотропии ядра  $K_C$  намного больше константы анизотропии оболочки  $K_S$ , что есть характерным для частиц кобальта, покрытых слоем оксида [26]. В этом случае механизм возникновения обменного поля смещения  $H_{EB}$  будет таким. При действии на частицу внешнего переменного магнитного поля  $\mathbf{h}(t)$  спиновые магнитные моменты ферромагнитного ядра испытывают ориентационное действие со стороны этого поля, в то время как спиновые моменты оболочки удерживаются более сильным эффективным полем анизотропии. Спиновые магнитные моменты оболочки, которые непосредственно прилегают к ферромагнитному ядру за счет взаимодействия через гранипу раздела ферромагнетик-антиферромагнетик обуславливают некоторое преимущественное направление спиновых магнитных моментов ядра. Это эквивалентно действию некоторого эффективного постоянного поля, которое и называют обменным полем смещения [26]. Такое поле проявляется в виде смещения петли гистерезиса (см. рис. 1).

Результаты, представленные на рис. 1, получены в рамках реализации модели Гейзенберга для следующих значений параметров: R = 9d, где d – период решетки;  $\Delta R = 2d$ ;  $J_C = 5$  K;  $J_S = -5$  K;  $J_{If} = -2,5$  K;  $K_C = 1$  K; T = 0,1 K. Внешнее поле прикладывалось вдоль оси легкого намагничивания и изменялось в пределах  $h \in [-15; 15]$  K с шагом  $\Delta h = 0,1$  K. Число шагов Монте-Карло на каждое значение поля –  $N = 5 \cdot 10^3$  на спин. По вертикальной оси графика рис. 1 отложена приведенная намагниченность ферромагнитного ядра, которая вычисляется следующим образом:

$$M = \frac{1}{N_R} \left| \sum_{i \in R} \mathbf{S}_i / S \right|$$
(2)

где  $N_R$  – количество спиновых магнитных моментов ядра,  $S = \left| S_i \right|$ .



**Рис.** 1 – Результаты моделирования магнитного гистерезиса наночастицы с покрытием (модель Гейзенберга): для фиксированных спинов оболочки (1), для охлажденной в поле частицы (2), для случая отсутствия взаимодействия в интерфейсном слое частицы (3)

Величины поля обменного смещения  $H_{EB}$  и коэрцитивной силы  $H_C$  определяются из графика рис. 1 как

$$H_{EB} = (H_{cl} + H_{cr})/2, \quad H_C = (H_{cl} - H_{cr})/2.$$
 (3)

В работе [26] были рассмотрены две модели моделирования спиновых систем – модель Изинга и модель Гейзенберга, и было показано, что модель Гейзенберга даёт более правдоподобные результаты. По этой причине в данной работе мы использовали именно эту модель.

### 3. ЗАВИСИМОСТЬ ОБМЕННОГО ПОЛЯ СМЕЩЕНИЯ ОТ РАЗЛИЧНЫХ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМЫ

### 3.1 Температурные зависимости

Естественный интерес представляет информация о том, как ведут себя обменное поле смещения и коэрцитивное поле при изменении параметров системы. Данный интерес диктуется практическими соображениями: воспользоваться новым свойством можно лишь обладая детальной фактической информацией о всех его проявлениях. Одним из наиболее важных параметров системы есть температура.

С ростом температуры любое магнитное упорядочение будет разрушаться. В предположении, что анизотропия ферромагнитного ядра меньше, чем анизотропия антиферромагнитной оболочки, для упрощения моделирования полагалось, что спины оболочки не подвержены тепловым флуктуациям и имеют жестко заданное антиферромагнитное упорядочение.

Результат моделирования в рамках вышеуказанного допущения приведен на рис. 2. Здесь были выбраны следующие параметры моделирования: R = 9d,  $\Delta R = 2d$ ;  $J_C = 10$  K;  $J_{If} = -5$  K;  $K_C = 1$  K. Внешнее поле прикладывалось вдоль оси легкого намагничивания и изменялось в пределах  $h \in [-3,5;3,5]$  K с шагом  $\Delta h = 0,1$  K. Число шагов Монте-Карло на каждое значение поля  $-N = 1 \cdot 10^3$  на спин. Спад кривой (1) до нуля указывает на разрушение ферромагнитного упорядочения ядра. Вследствие этого происходит также слабый спад величины обменного поля смещения, поскольку связь между фиксированными спинами оболочки и спинами ядра становится менее существенной в флуктуационной динамике спиновых магнитных моментов ядра.



**Рис. 2** – Температурные зависимости коэрцитивного поля  $H_C$  (1) обменного поля смещения  $H_{EB}$  (2)

## 3.2 Зависимости от радиуса ядра

Поскольку однонаправленная анизотропия есть результатом комплекса поверхностных эффектов, то она должна демонстрировать существенную зависимость от геометрических параметров наночастицы. В нашем случае частица имеет форму круга и геометрия границы раздела ядро-оболочка будет зависеть от радиуса частицы по двум причинам. Первая – это удельный вклад энергии пограничного взаимодействия по сравнению с общей энергией. Энергия взаимодействия спиновых магнитных моментов в ядре пропорциональна числу моментов, которое, в свою очередь, зависит от радиуса R по квадратичному закону. В то же время рост радиуса R приводит к линейному росту числа поверхностных спиновых магнитных моментов. Поэтому изучаемый эффект будет ярко выражен для сравнительно небольших частиц. Вторая причина заключается в различной форме пограничного слоя, и изменение R на единицу может приводить к значительным структурным изменениям поверхностного слоя и, в последствии, - характера процесса перемагничивания частицы.

Первым шагом исследования однонаправленной анизотропии для частиц с разными размерами есть нахождение зависимостей  $H_C(R)$  и  $H_{EB}(R)$ , как и в предыдущем случае температурной зависимости, для фиксированных спиновых магнитных моментов оболочки (см. рис. 3). Параметры моделирования здесь такие же, как и в предыдущем случае, с той разницей, что температура принималась T = 0,1 K, а число шагов Монте-Карло на каждое значение поля –  $N = 2 \cdot 10^3$  на спин.

Более реалистичная ситуация, в которой спины оболочки также подвержены тепловым флуктуациям, демонстрирует качественно подобные зависимости  $H_{EB}(R)$  и  $H_C(R)$ . Нами была проведена серия численных экспериментов для различного числа итераций, результаты которой представлены на рисунке 5.



**Рис. 3** – Зависимости коэрцитивного поля  $H_C(1)$  обменного поля смещения  $H_{EB}(2)$  от радиуса частицы

Из графика видно, что коэрцитивная сила  $H_C$  растет с радиусом в силу увеличения магнитной энергии спиновых магнитных моментов ядра. В то же время, как и ожидалось, обменное поле смещения  $H_{EB}$  показывает немонотонную зависимость в пределах, показанных на рисунке, на фоне общей тенденции к уменьшению при больших значениях радиуса R. На рис. 4 показаны два различных типа формирования поверхностного слоя, которые обуславливают разную степень влияния поверхностных эффектов и, следовательно, различные значения  $H_{EB}$ . Структуру, сходную с рис. 4 а, еще имеют частицы с радиусом ядра 5, 6 и 9, поэтому значения поля смещения для них больше, чем для частиц другого радиуса.



**Рис.** 4 – Разные типы пограничных слоев: R = 7d(a); R = 8d(b)

Здесь принималось, что значения параметров системы соответствуют вышеуказанным, константа обменного взаимодействия спиновых магнитных моментов оболочки –  $J_S = -5$  К; константа анизотропии –  $K_S = 20$  К. Как видно из графиков, с ростом числа итераций искомые зависимости приближаются к соответствующим зависимостям для фиксированных спиновых магнитных моментов оболочки. Отличия в графиках обусловлены, в том числе, и наличием близкорасположенных квазиравновесных уровней частицы, отличающихся упорядочением спиновых магнитных моментов оболочки. Для преодоления этой проблемы необходимо производить усреднение по большей выборке, чтобы учесть основные реализации ансамбля.



**Рис. 5** - Зависимости коэрцитивного поля  $H_C(1)$  обменного поля смещения  $H_{EB}(2)$  от радиуса частицы. Число итераций на спин:  $10^3(a)$ ;  $2 \cdot 10^3$  (б);  $5 \cdot 10^3$  (в)

# 3.3 Зависимости от константы обменного взаимодействия в пограничном слое

С ростом  $J_{If}$  по абсолютному значению растет поле смещения и уменьшается коэрцитивная сила, поскольку спиновые магнитные моменты оболочки являются «инициаторами» процесса перемагничивания. Следовательно, чем интенсивнее взаимодействие через интерфейсный слой – тем при меньших значениях внешнего поля будет начинаться

массовая переориентация спиновых магнитных моментов ядра. Любопытно, что зависимость  $H_{EB}(J_{If})$  есть нелинейная: значительный рост (по абсолютной величине) наблюдается только в интервалах (2; 4) и (-4; -2). В интервале значений  $J_{If}$  (-2; 2) частица практически не обнаруживает явления обменного смещения, несмотря на то, что величина коэрцитивного поля на данном интервале уже заметно изменяется.



**Рис. 6** – Зависимости коэрцитивного поля  $H_C(2)$  обменного поля смещения  $H_{EB}(1)$  от константы  $J_{If}$  обменного взаимодействия на границе ядра и оболочки

## 4. ВЫВОДЫ

Таким образом, в настоящей работе было численно изучено влияние температуры, радиуса ядра и константы обменного взаимодействия в пограничном слое на коэрцитивное поле и обменное поле смещения в спиновой системе по типу ядро-оболочка. Установлено, что разрушение ферромагнитного упорядочения ядра из-за увеличения температуры приводит к исчезновению коэрцитивной силы и уменьшению обменного поля смещения. Было показано, что коэрцитивная сила растет с радиусом ядра. В то же время обменное поле смещения сильно зависит от типа формирования поверхностного слоя и показывает немонотонную зависимость от радиуса ядра. С ростом константы обменного взаимодействия в пограничном слое по абсолютному значению растет поле смещения и уменьшается коэрцитивная сила.

## HYSTERESIS PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL SPIN SYSTEMS

A.Yu. Polyakov, T.V. Lyutyy, A.V. Rot-Serov

Sumy State University, 2, Rimsky-Korsakov Str., 40007, Sumy, Ukraine E-mail: <u>alexander.p87@mail.ru</u>

We present the numerical results of the temperature, the core radius, and the exchange interaction constant influence on the coercitivity and the exchange bias field of the core-shell spin system. We clarified, that the coercitivity disappeared and the exchange bias reduced with the temperature. It is shown, that the coercitivity grows with the core radius. At the same time, the exchange bias field shows the nonuniform dependence, because it is a function of outer layer type. When the constant of the exchange interaction grows, the absolute value of the exchange bias field increases as well, but the coercitivity decreases.

Keywords: TWO-DIMENSIONAL SPIN SYSTEMS, CORE-SHELL PARTICLE, COERCITIVITY, EXCHANGE BIAS FIELD, MAGNETIC HYSTERESIS.

## ГІСТЕРЕЗИСНІ ВЛАСТИВОСТІ ДВУМІРНИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

### О.Ю. Поляков, Т.В. Лютий, О.В. Рот-Ссров

Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, Суми, Україна E-mail: alexander.p87@mail.ru

У даній роботі наведені результати числових досліджень з метою з'ясування впливу температури, радіусу ядра і константи обмінної взаємодії в примежовому шарі на коерцитивну силу і обмінне поле в двовимірній системі спіна типу ядро-оболонка. Встановлено, що при збільшенні температури відбувається руйнування феромагнітного впорядкування ядра, що приводить до зникнення коерцитивної сили і зменшення обмінного поля зсуву. У роботі показано, що при збільшенні радіусу ядра коерцитивна сила зростає, хоча обмінне поле зсуву має немонотонну залежність від радіусу ядра. Поле зсуву за абсолютним значенням зростає при збільшенні константи обмінної взаємодії в примежовому шарі, а коерцитивна сила зменшується.

Ключові слова: ДВОВИМІРНІ СПІНОВІ СИСТЕМИ, НАНОЧАСТИНКА З ПОКРИТТЯМ, КОЕРЦИТИВНА СИЛА, ОБМІННЕ ПОЛЕ ЗМІЩЕННЯ, МАГНІТНИЙ ГІСТЕРЕЗИС.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. D. Hinzke, U. Nowak, Comp. Phys. Comm. 121-122, 334 (1999).
- 2. Z. Huang, Z. Chen, F. Zhang, Y. Du, Eur. Phys. J. B 37, 177 (2004).
- 3. M. Albrecht, S. Ganesan, Charles T. Rettner, *IEEE T. Magn.* 39 No5, 2323 (2003).
- E.Y. Tsymbal, O.N. Mryasov, P.R. Le-Clair, J. Phys.: Condens. Matter 15, R109 (2003).
- 5. I. Zutic, J. Fabian, S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- 6. М. Соколов, А. Гришин, Электронные компоненты №1, 88 (2007).
- 7. V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang, *Nature* **423**, 850 (2003).
- 8. J. Eisenmenger, I.K. Schuller, Nat. Mat. 2, 437 (2003).
- 9. X. Zianni, K.N. Trohidou, J. Phys.: Condens. Matter 10, 7475 (1998).
- 10. S.N. Piramanayagam, K. Srinivasan, J. Magn. Magn. Mater. 321, 485 (2009).
- 11. B.D. Terris, J. Magn. Magn. Mater. 321, 512 (2009).
- 12. Melissa J. Perenson, <u>http://www.pcworld.com/article/id,128400/article.html</u>.
- 13. J. Nogues, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev, Phys. Rep. 422, 65 (2005).
- 14. W.H. Meiklejohn, Phys. Rev. 105 No3, 904 (1957).
- 15. D. Fiorani, L. Del Bianco, A.M. Testa, K.N. Trohidou, *Phys. Rev. B* **73**, 092403 (2006).
- 16. T.C. Schulthess, W.H. Butler, Phys. Rev. Lett. 81 No20, 4516 (1998).
- 17. J. Sort, J. Nogues, Appl. Phys. Lett. 79 No8, 1142 (2001).
- 18. U. Nowak, K.D. Usadel, J. Keller, P. Miltenyi, B. Beschoten, and G. Guntherodt, *Phys. Rev. B* 66, 014430 (2002).

- 19. T. Iglesias, A. Labarta, *Physica B* 372, 247 (2006).
- 20. T. Iglesias, X. Batlle, A. Labarta, Phys. Rev. B 72, 212401 (2005).
- 21. N.C. Koon, Phys. Rev. Lett. 78 No25, 4865 (1997).
- 22. E. Eftaxias, K.N. Trohidou, C. Binns, phys. stat. sol. (C) 1 No12, 3361 (2004).
- 23. Z. Huang, Sh. Li, J. Magn. Magn. Mater. 303, 180 (2006).
- 24. Методы Монте-Карло в статистической физике; пер. с англ. (Ред. К. Биндера) (М.: Мир: 1982).
- 25. Х. Гулд, Я. Тобочник, Компьютерное моделирование в физике: в 2-х частях. Часть 2; пер. с англ. (М.: Мир: 1990).
- 26. Т.В. Лютый, А.Ю. Поляков, А.В. Рот-Серов, Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка №9(93), 63 (2006).
- 27. E. Eftaxias, K.N. Trohidou, Phys. Rev. B 71, 134406 (2005).