

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА В ДВУМЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ

Т.В. Лютый, канд. физ.-мат. наук; А.Ю. Поляков, студент;

А. В. Ром-Серов, студент

Сумский государственный университет, ул. Р.-Корсакова, 2, Сумы, 40007

E-mail: LyutyTV@mail.ru

В работе представлено численное исследование явления однонаправленной анизотропии или обменного смещения в двумерной комплексной наночастице по типу ядро-оболочка. В рамках моделей Изинга и Гейзенберга была выявлена природа однонаправленной анизотропии. Она состоит в обменном взаимодействии антиферромагнитной оболочки и ферромагнитного ядра в интерфейсном слое наночастицы. Было показано, что модель Гейзенберга, в которой шаг Монте-Карло производится в пределах малого конуса вокруг текущего положения спина, наилучшим образом подходит для моделирования динамики спинов в ферромагнитной наночастице с антиферромагнитным покрытием.

ВВЕДЕНИЕ

Изучение сложных магнитных систем является одним из приоритетных направлений современной физики. В первую очередь это вызвано факторами прикладного характера, поскольку магнитные материалы широко применяются в различных компонентах современных ИТ-устройств. Бурное развитие информационных технологий и их огромное социально-экономическое значение на данном этапе развития общества выдвигает все более высокие требования перед индустрией средств мультимедиа. Удовлетворить этим требованиям можно, только обладая глубокими знаниями о природе процессов, протекающих как в производстве компонентов ИТ-устройств, так и во время их функционирования.

Среди новых перспективных магнитных материалов следует выделить целый класс композитов, образованных упорядоченными ансамблями однодоменных ферромагнитных частиц, внедренных в немагнитную твердую матрицу. Так, двумерные решетки таких частиц, легкие оси которых перпендикулярны плоскости распределения, являются непосредственными носителями информации для устройств записи, называемых perpendicular patterned-media (PPM) [1-4]. Примечательно, что прогнозируемая плотность записи последних ~ 100 Tbit/inch². Ансамбли более сложных по геометрии и структуре нанообъектов – магнитных туннельных переходов (magnetic tunnel junctions) [5] – успешно применяются в новых перспективных устройствах спинтроники, таких, как модули энергонезависимой памяти (MRAM) [6-9], сверхчувствительные магнитные датчики.

Миниатюризация компонентов вычислительной техники при одновременном увеличении производительности возможна исключительно за счет уменьшения размеров их базовых структурных элементов. Это неизбежно приводит к неустойчивости основных свойств таких элементов относительно тепловых флуктуаций. Так в PPM-накопителях, где битам данных соответствуют определенные направления магнитных моментов наночастиц, термоиндуцированные изменения этих направлений эквивалентны потерям информации. В вычислительных компонентах

неустойчивость к тепловым флуктуациям обуславливает нестабильность процесса вычисления и, следовательно, приводит к ошибкам в обработке данных.

Существенно улучшить термостабильность магнитного момента ферромагнитной наночастицы можно за счет покрытия ее антиферромагнитной оболочкой [10,11]. Взаимодействие пограничных спинов ферромагнитного ядра и антиферромагнитной оболочки, толщина которой составляет несколько атомных слоев, приводит к возникновению нового свойства – так называемой однонаправленной анизотропии [12], при которой магнитный момент наночастицы обладает только одним равновесным направлением. Данное явление принято характеризовать величиной эффективного поля, называемого обменным полем смещения. Особенную важность такой подход приобретает ввиду стремительного развития инструментальной базы нанотехнологий [13, 14], которая на современном этапе позволяет создавать столь малые объекты со сложной структурой.

Явление однонаправленной анизотропии впервые было обнаружено еще в 1956 году [15] и интенсивно изучается в последнее десятилетие [12], однако его природа так и не выяснена до конца. В отсутствие удовлетворительного теоретического описания большое значение приобретает численный эксперимент. Традиционно для поиска равновесных свойств ансамблей магнитных моментов используется так называемое микромагнитное моделирование, основанное на методах Монте-Карло [16, 17]. Несмотря на то, что численные исследования магнитных наночастиц указанным методом проводятся достаточно давно, изучению частиц с покрытием посвящено лишь небольшое количество современных работ [18 - 20]. В силу новизны задачи на данном этапе отсутствует как подробная информация о влиянии внутренних свойств на величину поля обменного смещения, так и остается неясным ряд технических вопросов относительно самого численного моделирования.

Опыт численного исследования подобных систем показывает, что процесс моделирования требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому для тестирования конкретных алгоритмов и методик целесообразно использовать низкоразмерные модели. В данной работе мы использовали двумерные модели, которые, с одной стороны, позволяют наблюдать явление смещения петли гистерезиса, присущее реальным наночастицам с покрытием, а с другой стороны - не требуют значительных затрат машинного времени. Кроме того, такие модели могут иметь и самостоятельную ценность как для изучения магнитных свойств моноатомных пленок, так и для описания трехмерных структур, характеризующихся несколькими осями анизотропии.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ МОДЕЛЕЙ

Рассмотрим участок двумерной квадратной решетки спиновых магнитных моментов S_i , ограниченный окружностью радиуса $R + \Delta R$. Будем считать, что вектора S_i лежат в плоскости данной окружности и взаимодействуют друг с другом посредством обменного взаимодействия. Также полагаем, что взаимодействие в пределах окружности радиуса R является ферромагнитным и характеризуется константой J_C , а в кольце внутренним радиусом R и толщиной ΔR – антиферромагнитным с константой J_S . Взаимодействие пограничных спинов ферромагнитного ядра и антиферромагнитной оболочкой характеризуется константой J_{If} , знак которой определяет характер взаимодействия. В предположении, что ось легкого намагничивания ядра совпадает с аналогичной осью оболочки, а константы анизотропии ядра K_C и оболочки K_S находятся в

соотношении $K_C \ll K_S$, что есть характерным для частиц кобальта, покрытых слоем оксида [15], механизм возникновения обменного поля смещения H_{EB} следующий. 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 границу раздела ферромагнетик-антиферромагнетик, обуславливают некоторое преимущественное направление спинов ядра. Это эквивалентно действию некоторого эффективного постоянного поля, которое и называют обменным полем смещения.

Для непосредственного осуществления моделирования запишем гамильтониан в форме, традиционно используемой в рамках подобных задач [18-20]:

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

Здесь угловые скобки обозначают суммирование по ближайшим соседям. Наиболее простой в реализации является модель Изинга [17]. Ее простота обусловлена предположением о существовании только двух возможных положений вектора \mathbf{S}_i вдоль легкой оси. Такой подход оправдан для систем с большой анизотропией, и благодаря низким требованиями к вычислительной мощности ЭВМ, он успешно применялся для исследования фазовых переходов и магнитной восприимчивости макроскопических ферромагнитных образцов [16].

Поэтому, естественно, что первым шагом в исследовании явления однонаправленной анизотропии стало применение модели Изинга к исследуемой системе. Численный эксперимент проводился в три этапа. На первом из них полагалось, что все спины оболочки имеют одинаковое направление и сохраняют свои начальные позиции на протяжении всего моделирования. Были выбраны следующие значения параметров: $R = 9d$, где d – период решетки; $\Delta R = 2d$; $J_C = 5 K$; $K_C = 1 K$; $J_{If} = -2,5 K$; $T = 0,1 K$. 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. Шагом Монте-Карло в соответствии с алгоритмом Метрополиса [16, 17] называется численное испытание, проводимое над случайно выбранным спином системы, состоящее в инвертировании его текущего положения в соответствии с вероятностью $p \sim \exp(-\Delta E/T)$. Здесь ΔE – разность между энергиями инвертированного и текущего положений выбранного спина. Поскольку энергия анизотропии для любого из двух состояний остается неизменной, для корректного учета влияния анизотропии полагалось, что инвертирование сопровождается преодолением потенциального барьера $K_C (\mathbf{S}_i)^2$, величина которого прибавлялась к ΔE .

На втором этапе процесс моделирования проводился в соответствии с методикой реальных экспериментов [8, 18]: частица охлаждалась в присутствии постоянного магнитного поля. Начальная температура $T_1 = 15 \text{ K}$, шаг по температуре $\Delta T = 0,1 \text{ K}$, $J_S = -2,5 \text{ K}$. Значения остальных параметров совпадают с предыдущим случаем. Такое решение позволяет системе приблизиться к конфигурации, отвечающей минимуму энергии. Третий этап повторяет второй с тем отличием, что $J_{If} = 0 \text{ K}$. По сути, это соответствует моделированию поведения частицы без оболочки. Результаты моделирования представлены на рисунке 1. Здесь по вертикальной оси отложена приведенная намагниченность ферромагнитного ядра

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

где N_R – количество спинов ядра.

В случае фиксированных спинов оболочки эффективное поле однонаправленной анизотропии оказывается максимальным, о чем свидетельствует максимальный сдвиг петли гистерезиса. В состоянии с наименьшей энергией, к которому приближается система в процессе охлаждения, пограничные спины оболочки имеют некоторое преимущественное направление, вдоль которого, однако, ориентированы не все спины, что эквивалентно уменьшению эффективного поля (рис.1б, 1). Это подтверждается меньшим по величине смещением петли гистерезиса (рис.1б, 2). И, наконец, при отсутствии взаимодействия в интерфейсном слое, смещение петли будет отсутствовать (рис.1б, 3). Совокупность полученных данных однозначно показывает, что причиной однонаправленной анизотропии есть обменное взаимодействие спинов ядра и оболочки в интерфейсном слое. Величина моля обменного смещения H_{EB} определяется из графика, как

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

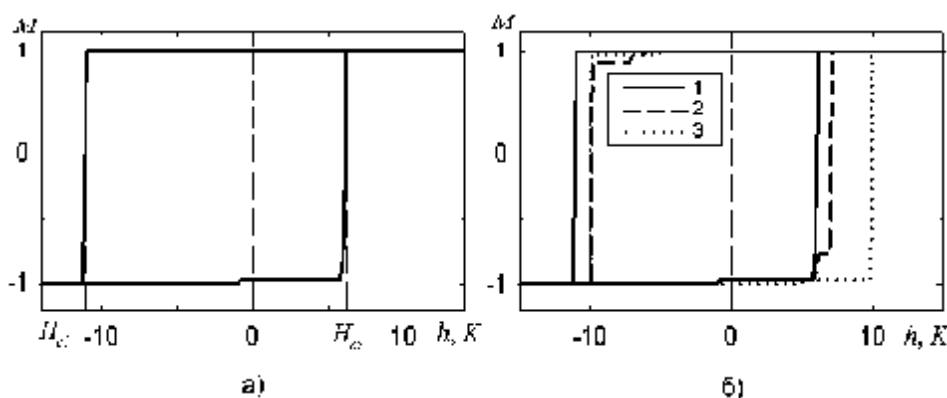


Рисунок 1 – Модель Изинга. Магнитный гистерезис наночастицы с покрытием: а) для фиксированных спинов оболочки; б) для фиксированных спинов оболочки (1), для охлажденной в поле частицы (2), для случая отсутствия взаимодействия в интерфейсном слое частицы (3)

Анализ результатов показывает, что для данной задачи модель Изинга является нереалистичной, что в первую очередь связано с предложением о наличии только двух положений вектора спина S_i . Данное упрощение затрудняет исследование явления однонаправленной анизотропии, поскольку в процессе численного эксперимента спины оболочки не удерживаются в первоначальном положении. Кроме того, в рамках данной модели процесс перемагничивания происходит посредством образования и последующего движения доменной границы (см. рис.2). Это противоречит известному факту, что перемагничивание достаточно малой частицы происходит за счет когерентного вращения всех ее спинов [21].

Главные недостатки модели Изинга устраняет модель Гейзенберга, которая допускает произвольную ориентацию спинов системы S_i . В то же время эта модель требует гораздо больших затрат машинного времени и, главное, допускает различные варианты реализации, дающие принципиально различные результаты. Первый вариант основан на произвольном изменении полярного угла, задающего направление спина, во всей области допустимых значений $(0; 2\pi]$ в пределах каждого шага Монте-Карло. Однако, как и в случае модели Изинга, такой подход не учитывает, что одна и та же энергия анизотропии может соответствовать двум положениям спина в силу квадратичной зависимости энергии анизотропии от его направления: $K_C (S_i e_i)^2 = K_C S_i^2 \cos^2 \theta_i$. Здесь θ_i – полярный угол спина S_i . Добавление к разности энергий предыдущего и последующего положений спинов определенной величины потенциального барьера в данном случае приведет к резкому увеличению затрат машинного времени, поскольку эту величину нужно вычислять заново на каждом шаге. Второй вариант реализации модели Гейзенберга предполагает изменение направления выбранного спина на каждом шаге Монте-Карло лишь в пределах некоторой небольшой окрестности $\Delta\theta$ ($\Delta\theta = 30^\circ$) от первоначального положения θ_i . Именно этот подход обеспечивает должную реалистичность моделирования динамики спиновых магнитных моментов наночастицы с покрытием при приемлемых затратах машинного времени. Это подтверждается в том числе и протеканием процесса перемагничивания наночастицы в соответствии с моделью когерентного вращения спинов (см. рис.3).

Результаты моделирования представлены на рисунке 4. Для сравнения параметры частицы выбраны точно такими же, как и для модели Изинга (см. рис.1). Как и ранее, здесь моделирование проводилось для фиксированных спинов оболочки, для охлажденной в поле частицы и для случая отсутствия взаимодействия в пограничном слое. Как видно из рисунков 1б и 4а, общий характер размещения петель гистерезиса для обеих моделей одинаков, однако есть ряд отличий, обусловленных спецификой каждой модели. Так, коэрцитивная сила

$$H_C = (H_{cr} - H_{cl})/2, \quad (4)$$

предсказываемая моделью Гейзенберга при одинаковом числе шагов Монте-Карло, оказывается на порядок меньше, чем для модели Изинга. Это продиктовано большей гибкостью модели Гейзенберга. Второе отличие связано с ярко выраженным уменьшением коэрцитивной силы для модели Гейзенберга при наличии оболочки. Это указывает на большую роль пограничных спинов оболочки в иницировании перемагничивания частицы.

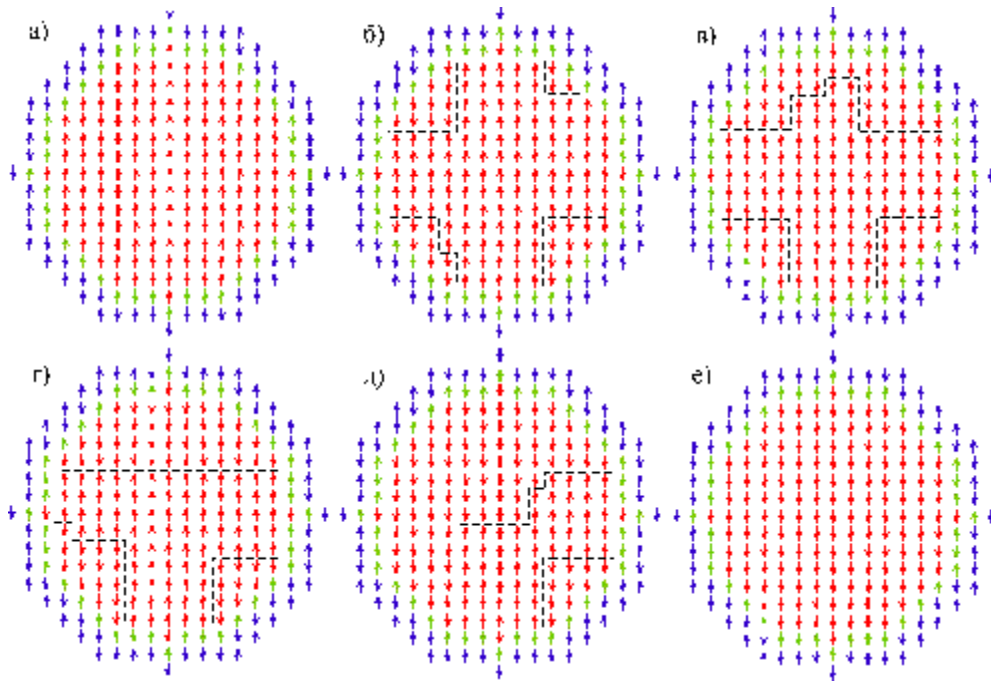


Рисунок 2 – Модель Изинга. Процесс перемагничивания наночастицы. Светлые стрелки – пограничные спины оболочки. Пунктирная линия – доменная граница

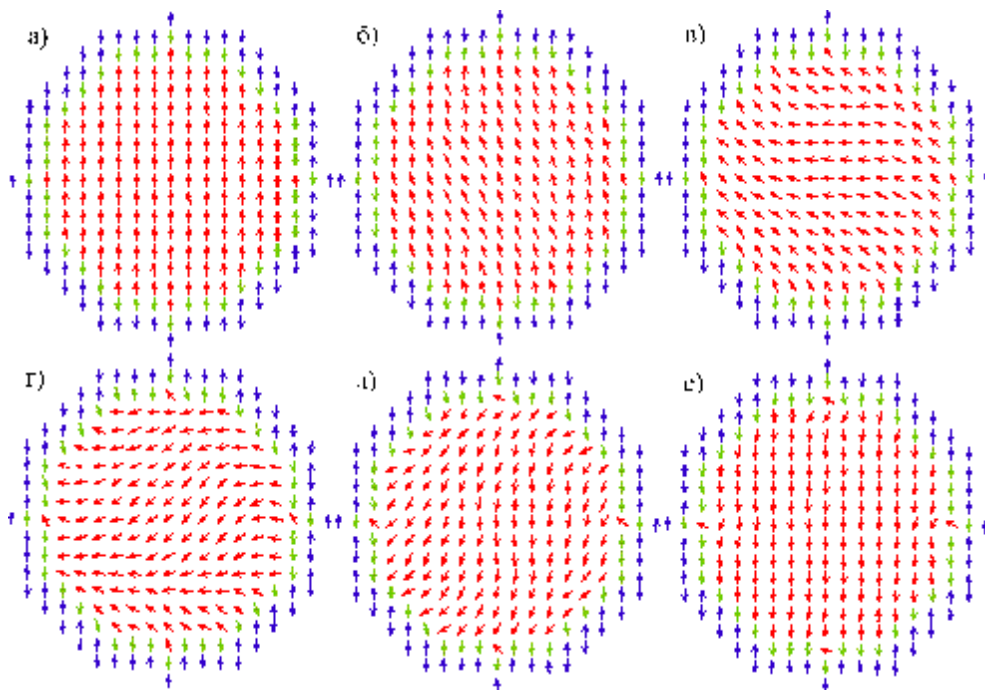


Рисунок 3 – Модель Гейзенберга. Процесс перемагничивания наночастицы (когерентное вращение). Светлые стрелки – пограничные спины оболочки

В литературе можно встретить результаты численного исследования магнитных спиновых систем с помощью так называемого комбинированного метода, изложенного в работе [22]. Суть этого метода состоит в использовании трех типов шагов Монте-Карло. Первый тип подразумевает обычную инверсию вектора S_i , второй тип состоит в изменении направления спина S_i на произвольный угол, третий – изменение направления S_i в малой окрестности его предыдущего положения. Авторы утверждают, что при определенном соотношении числа шагов всех трех типов, процесс моделирования является наиболее эффективным с точки зрения отношения машинных затрат и реалистичности. Однако такое утверждение необоснованно, поскольку, как было указано выше, только изменение положения спина в некоторой окрестности от первоначального положения в рамках одного шага Монте-Карло позволяет адекватно описывать процессы перемангничивания наночастиц.

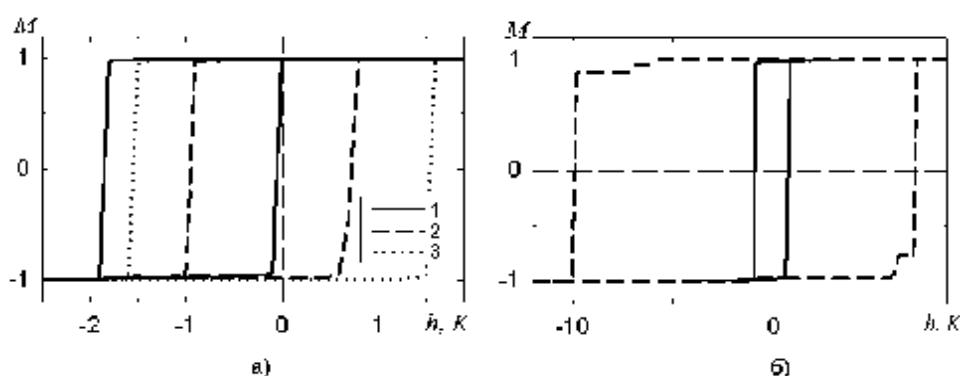


Рисунок 4 – Магнитный гистерезис наночастицы с покрытием. Модель Гейзенберга: а) для фиксированных спинов оболочки (1), для охлажденной в поле частицы (2), для случая отсутствия взаимодействия в интерфейсном слое частицы (3); б) сравнение с моделью Изинга (пунктирная линия)

ВЫВОДЫ

Таким образом, в настоящей работе было численно изучено явление однонаправленной анизотропии для двумерной сложной спиновой системы по типу ядро-оболочка. Установлено, что причиной данного явления есть взаимодействие пограничных спинов ядра и оболочки в интерфейсном слое, а также большая магнитная анизотропия материала оболочки. Был проведен сравнительный анализ применения различных моделей реализации численного эксперимента. Показано, что адекватно отразить реальную динамику спиновых магнитных моментов можно только в рамках модели Гейзенберга, причем случайные изменения положений спиновых магнитных моментов на каждом шаге Монте-Карло нужно проводить лишь в небольшой окрестности их текущих положений. Полученные результаты могут быть использованы для изучения явления однонаправленной анизотропии в трехмерных спиновых системах.

Авторы благодарят за поддержку Европейскую комиссию, проект NANOSPIN Contract No: NMP4-CT-2004-013545.

SUMMARY

SIMULATION OF THE HYSTRESIS IN TWO-DIMENSIONAL SPIN SYSTEMS

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

Sumy State University, R.-Korsakov str., 2, Sumy, 40007

We present numerical studies of unidirectional anisotropy or exchange bias effect in core-shell complex two-dimensional nanoparticle. Within the frameworks of Ising and Heisenberg models the origin of exchange bias is revealed: it is an exchange interaction via interface of antiferromagnetic shell and ferromagnetic core of the nanoparticle. It was shown that Heisenberg model with Monte-Carlo step within small cone around the current spin position is more applicable for numerical simulation of spin dynamics in the complex core-shell nanoparticle.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M. Albrecht, C. T. Rettner, A. Moser Recording performance of high-density patterned perpendicular magnetic media // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – Vol.81, №15. – P.2875-2877.
2. M. Albrecht, S. Ganesan, Charles T. Rettner Patterned Perpendicular and Longitudinal Media: A Magnetic Recording Study // *IEEE Trans. Magn.* – 2003. – Vol.39, №5. – P.2323-2325.
3. J. Moritz, L. Buda, B. Dieny, and J. P. Nozieres Writing and reading bits on pre-patterned media // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – Vol.84, №9. – P.1519-1521.
4. A. Moser, K. Takano, D.T., Margulies, M. Albrecht, Y. Sonobe, Y. Ikeda, S. Sun, E.E. Fullerton Magnetic recording: advancing into the future // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2002. – Vol.35. – P.R157-R167.
5. R. Skomski Nanomagnets // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2003. – Vol.15. – P.R841-R896.
6. E.Y. Tsymbal, O.N. Mryasov and P.R. LeClair Spin-dependent tunnelling in magnetic tunnel junctions // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2003. – Vol.15. – P.R109-R142.
7. Costa-Krumer J.L., Anguita J., Martin J.I., Martinez-Boubeta C., Cebollada A., Briones F. Magnetic coupling in epitaxial Fe/MgO/Fe microtunnel junction arrays // *Nanotechnology.* – 2002. – Vol.13. – P.695-700.
8. Ph. Moriarty Nanostructured materials // *Rep. Prog. Phys.* – 2001. – Vol.64. – P.297-381.
9. B.F. Cockburn Tutorial on magnetic tunnel junction magnetoresistive random-access memory // *IEEE Trans. Magn.* – 2004. – №9-10. – P.46-51.
10. V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang Beating the superparamagnetic limit with exchange bias // *Nature.* – 2003. – Vol.423. – P.850-853.
11. J. Eisenmenger, I. K. Schuller Magnetic nanostructures: Overcoming thermal fluctuations // *Nature Materials* – 2003 – Vol.2.– P.437-438.
12. J. Nogués, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev Exchange bias in nanostructures // *Physics Reports.* – 2005. – Vol.422. – P. 65 – 117.
13. *Nanotechnology – Shaping the world atom by atom.* NSTC report. I. Amato. – Washington. – September, 1999.
14. *Societal implications of nanoscience and nanotechnology.* NSET workshop report. Edited by M.C. Roco and W.S. Bainbridge. – Arlington. – March, 2001.
15. W.H. Meiklejohn, C.P. Bean New Magnetic Anisotropy // *Phys. Rev.* – 1957. – Vol.105, №3. – P.904-913.
16. *Методы Монте-Карло в статистической физике* / Под. ред. К. Биндера / Пер с англ. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
17. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2 частях. Часть 2 / Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 400 с.
18. T. Iglesias, X. Batlle, A. Labarta Microscopic origin of exchange bias in core/shell nanoparticles // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol.72. – 212401(4).
19. T. Iglesias, A. Labarta Monte Carlo simulation study of exchange biased hysteresis loops in nanoparticles // *Physica B.* – 2006. – Vol.372. – P.247-250.
20. E. Eftaxias, K. N. Trohidou Numerical study of the exchange bias effects in magnetic nanoparticles with core/shell morphology // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol.71. – 134406(6).
21. Stoner E.C., Wohlfarth E.P. A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys // *Phys. Dept., Univ. of Leeds, UK.* – 1948 (Переиздано в *IEEE Trans. Magn.* – 1991. – Vol.27, №4. – P.3475-3518).
22. D. Hinzke, U. Nowak Monte Carlo simulation of magnetization switching in a Heisenberg model for small ferromagnetic particles // *Comp. Phys. Comm.* – 1999. – №121-122. – P.334-337.

Поступила в редакцию 6 октября 2006 г.