

УДК 539.23

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В ТРЕХСЛОЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ЖЕЛЕЗА

© 2023 г. М. Ю. Макеев¹, М. В. Мамонова¹, *

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Омский государственный университет имени Ф.М. Достоевского”, Омск, Россия

*E-mail: mamonovamv@omsu.ru

Поступила в редакцию 28.10.2022 г.

После доработки 15.11.2022 г.

Принята к публикации 26.12.2022 г.

В рамках теории функционала спиновой плотности изучены энергетические и магнитные свойства систем Fe/Cr/Fe, Fe/Pt/Fe с использованием пакета программ VASP. Расчеты зависимости полной энергии от угла направления магнитного момента атомов показали преимущество перпендикулярной анизотропии для Fe/Cr/Fe при всех рассмотренных толщинах пленок Fe и ориентации поверхности. Для Fe/Pt/Fe наблюдается более сложная зависимость, но с увеличением толщины пленки железа наблюдается преобладание анизотропии типа легкая плоскость.

DOI: 10.31857/S0367676522700879, EDN: NLKING

ВВЕДЕНИЕ

Благодаря широкой области применения исследование ультратонких магнитных пленок имеет не только фундаментальный, но и практический интерес. Магнитные пленки используются в разных областях, например, в устройствах спинтроники, микро- и нанозлектроники, в спин-вентильных системах [1, 2], различных датчиках магнитных и электрических полей [3], а также в качестве магнитных носителей.

Магнитная анизотропия (МА) является одним из ключевых параметров магнитных материалов. Это релятивистское проявление связи между спином электрона и орбитальным моментом (спин-орбитальная связь). Модификация электронной структуры на поверхностях, вызывающая изменение магнитной анизотропии, приводит к особому магнитному поведению в ультратонких магнитных пленках, например, к перпендикулярной магнитной анизотропии, индуцированной границей раздела.

Изучение анизотропии представляет большой интерес для современных исследователей [4]. Расчет магнитной анизотропии в металлических многослойных пленках проводился как экспериментально, так и теоретически и представлены в обзорах [5, 6]. Магнитные свойства пленок Fe, а также поведение обменно-связанных структур на их основе являются предметом интенсивных исследований [7]. Комбинация материалов Fe/Cr/Fe

была первой, в которой проявился эффект гигантского магнитосопротивления ГМС – открытие, положившее начало спинтронике. Поскольку магнитное состояние структур Fe/Cr/Fe может быть изменено относительно слабым магнитным полем, эти слои можно рассматривать как модельные системы для изучения многих аспектов тонкопленочного магнетизма.

Можно предположить, что знак энергии магнитной анизотропии E_{MA} определяется самой ферромагнитной пленкой (ее материалом и ориентацией) и не зависит от немагнитной подложки. Этому утверждению способствуют исследования E_{MA} Ni(111), которые показывают легкую плоскость для Cu, Ag, Pd [8], и Co(111), которое показывает всегда перпендикулярную E_{MA} [9] для Ag, Au, Cu, Ir, Mo, Pd и Pt подложек. Но это правило нарушается для пленок Fe, которые на W(110) намагничены всегда в плоскости в результате легкоплоскостной анизотропии магнитной поверхности, а на Cr(110) пленки Fe демонстрируют перпендикулярную намагниченность до толщины примерно 3 монслоя [10]. Экспериментальная работа по магнитной поверхностной анизотропии показывает перпендикулярную E_{MA} для Fe(100) на Ag, Au [11].

В работе [12] для одиночного монслоя Fe на Pt(111) показаны случаи преобладания анизотропии в плоскости. Эти расчеты основаны на подходе функции Грина в рамках экранированного

полностью релятивистского метода Кона–Корринги–Ростокера и приближениях локальной плотности и идеализированной геометрии, воспроизводящей объемную структуру подложки. В [13] также рассчитывалась монослойная пленка Fe на Pt(100), было продемонстрировано влияние релаксации на преобладающий тип анизотропии. Таким образом, несмотря на чрезвычайный интерес к подобным системам в связи с наблюдаемыми в них явлениями непрямой связи, окончательных выводов еще не сделано.

Данная работа посвящена исследованию $E_{\text{МА}}$ пленок Fe, разделенных слоями Cr и Pt с использованием формализма теории функционала спиновой плотности (SDFT) и расчета самосогласованной зонной структуры. Кроме того, в отличие от наиболее распространенных расчетов, когда рассматривается только одна грань, мы исследовали различные ориентации поверхностных граней, в частности (100), поскольку она дает квадратную ячейку поверхности, которая используется в расчетах методом Монте-Карло. Результаты наших расчетов методом Монте-Карло [14] показали, что случай перпендикулярной анизотропии приводит к полезному увеличению магнитосопротивления. Но для сравнения результатов численного моделирования с экспериментом необходимо знать тип анизотропии и значение параметра анизотропии для конкретных систем. Поэтому в данной работе ставилась задача, исследовать эффекты анизотропии для трехслойных структур Fe/Pt/Fe, Fe/Cr/Fe методом функционала спиновой плотности с использованием программного комплекса VASP [15]. Определить магнитные моменты и вычислить значения энергии магнитной анизотропии в зависимости от ориентации поверхностной грани и толщины слоев. Рассчитать параметр анизотропии Δ для анизотропии типа легкая ось и анизотропии типа легкая плоскость.

РАСЧЕТЫ ЭНЕРГИИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ

В основе расчетов из первых принципов электронной и кристаллической структуры магнитных материалов лежит теория функционала спиновой плотности. Мы использовали для моделирования трехслойных структур программный пакет VASP с помощью метода проекционных присоединенных волн (PAW) с псевдопотенциалом Пердюю–Берке–Эрнцерхофа (PBE) версией обобщенного градиентного приближения (GGA). Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводилось с использованием k -сетки, построенной по методу Монкхорста–Пака. Исследование сходимости разности ΔE энергий ферромагнитных ФМ и антиферромагнитных АФМ конфигураций пленок Co и Fe разделенных пластиной

Si и Pt по количеству k -точек, проведенное нами в [16], показало, что для ΔE сходимость намного хуже, чем для полной энергии, и мы должны использовать большие значения количества k -точек. В данных расчетах размер k -сетки составлял $32 \times 32 \times 1$. Энергия обрезания базиса плоских волн была выбрана равной 500 эВ при толщине слоя вакуума 5 Å.

Система представляла собой пластину из немагнитного металла с ориентацией поверхностной грани с низкими значениями индекса Миллера, с адсорбированными в положении междоузлий на ней ферромагнитными пленками с двух сторон для сохранения инверсионной симметрии. Для моделирования многослойной структуры использовалась периодическая суперъячейка с постоянной решетки, соответствующей подложке, полученной в результате расчетов с учетом оптимизации параметров решетки. Рассчитанные равновесные параметры решетки 3.87125(3) Å для Pt и 2.8365(7) Å для Cr, что близко к экспериментальным значениям 3.9158 и 2.8839 Å.

В локализованном случае спины связаны через спин-орбитальное взаимодействие с орбиталями, на которые, в свою очередь, влияет кристаллическая решетка. Для зонных материалов спин-орбитальное взаимодействие индуцирует небольшой орбитальный момент, который затем связывает полный магнитный момент с осями кристалла. Это приводит к полной энергии, которая зависит от ориентации намагниченности относительно осей кристалла. Это дает вклад в анизотропию

Когда присутствует спин-орбитальная связь, внутриатомная намагниченность $m(r)$ не является коллинеарной, и твердое тело может выбирать разные оси квантования, зависящие от атома, что приводит к тому, что магнитные моменты направлены в разные стороны. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия направления спинов не связаны с кристаллической структурой, т.е. система инвариантна относительно общего вращения всех спинов. Поэтому все наши расчеты эффектов магнитной анизотропии, приведенные в данной работе, проведены с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Энергия магнитной анизотропии $E_{\text{МА}} = E_{\perp} - E_{\parallel}$ рассчитывалась как разность полной энергии системы с намагниченностью, направленной перпендикулярно и параллельно плоскости поверхности. При $E_{\text{МА}} < 0$ более энергетически выгодна ориентация магнитных моментов перпендикулярно поверхности, что соответствует анизотропии легкая ось. При $E_{\text{МА}} > 0$ ориентация магнитных моментов параллельно поверхности более энергетически выгодна, что соответствует анизотропии легкая плоскость.

Результаты расчетов энергии магнитной анизотропии для монослойных пленок железа, в за-

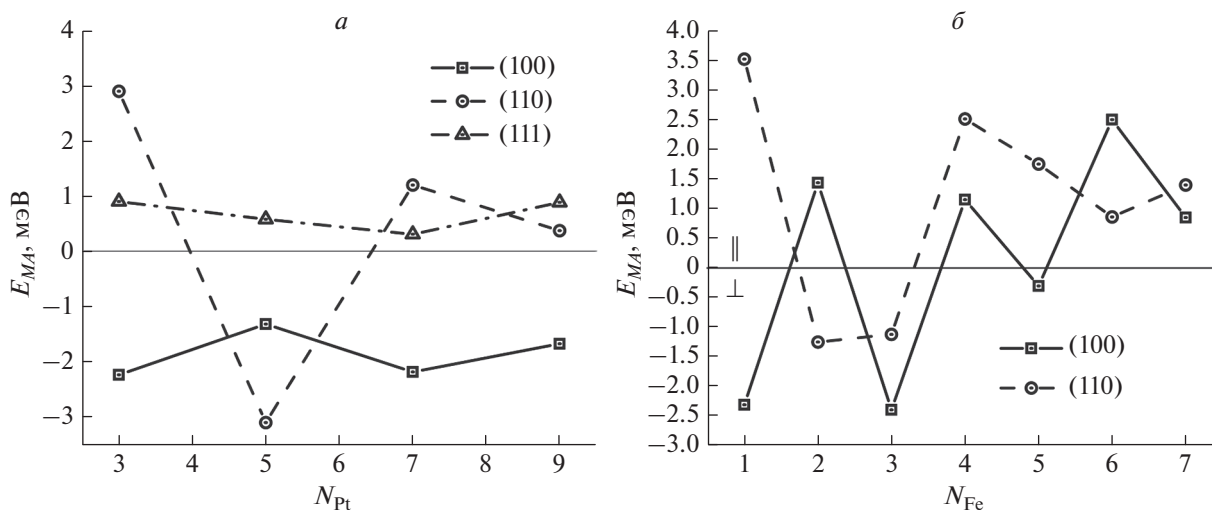


Рис. 1. Зависимость энергии магнитной анизотропии системы Fe/Pt/Fe от толщины слоя платины (а) и железа (б) для различных ориентаций поверхностной грани.

висимости от толщины разделяющего их слоя платины приведены на рис. 1а. Можно увидеть, что перпендикулярная анизотропия для монослойных пленок железа с прослойкой платины возникает только для грани (100) для всех толщин пластины Pt и для грани (110) для толщины пластины Pt в 5 монослоев. А для более плотноупакованной грани (111) для всех толщин немагнитной прослойки более энергетически выгодна анизотропия типа легкая плоскость со значениями $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} \approx 0.5-1.0$ мэВ. Наши расчеты подтверждаются расчетами других авторов. В статье [17] исследовали адсорбцию кластеров железа разного размера вплоть до монослоя на поверхностной грани Pt(111). Расчеты были выполнены с применением метода Корринги–Кона–Ростокера при толщине подложки Pt в 37 монослойных слоев без учета релаксации системы. Для монослоя было показано преобладание анизотропии типа легкая плоскость со значением $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} = 0.26$ мэВ. В статье [12] расчеты одиночного монослоя Fe на Pt(111) также демонстрируют преимущество плоскостной магнитной анизотропии, но с большим значением $E_{MA} = 0.71$ мэВ. В [13] получено для монослоя Fe на Pt(100) с учетом релаксации энергетическую выгодность перпендикулярной магнитной анизотропии.

Чтобы лучше понять природу магнитной анизотропии в системе Fe/Pt, мы решили изучить влияние толщины магнитной пленки, фиксируя толщину немагнитной подложки. Была рассчитана энергия магнитной анизотропии E_{MA} для граней (100) и (110) для толщины подложки в 3 монослоя и толщинах пленки от 1 до 7 монослоев. Результаты представлены на рис. 1б. Из графиков можно увидеть, что наибольшие значения E_{MA}

наблюдаются для монослойной пленки. С увеличением толщины магнитной пленки меняется не только значение E_{MA} , но и тип преобладающей анизотропии. Так, начиная с толщины пленки железа в 6 монослоев, наблюдается преобладание анизотропии типа легкая плоскость и сходимость E_{MA} к значению около 1.0 мэВ. Для меньших толщин наблюдаются осцилляции E_{MA} с периодом в 2 монослоя для грани (100) и 3 монослоя для грани (110). Такая величина периода для этих граней близка к постоянной решетке железа.

Дальше были проведены расчеты, в которых направление вектора намагниченности изменялось в плоскости XZ, а угол Θ отсчитывался от оси Z. Рассматривались системы Fe/Cr/Fe и Fe/Pt/Fe при толщине прослойки в 3 и толщинах пленки в 1–4 атомных слоя. На рис. 2 приведена зависимость разности полных энергий $E(\Theta) - E_{\min}$, где $E(\Theta)$ – рассчитанное значение полной энергии при заданном угле Θ направлении вектора намагниченности, а E_{\min} – минимальное из всех полученных значений. Таким образом, равенство нулю данной величины, показывает направление преобладающей анизотропии. Графики демонстрируют плавное изменение и наличие минимума или при угле $\Theta = 0^{\circ}$, что соответствует перпендикулярной анизотропии, или при $\Theta = 90^{\circ}$, что соответствует параллельной анизотропии. Значения энергии магнитной анизотропии приведены в табл. 1. Максимальная E_{MA} для монослойной пленки. Расчеты показали, что для системы Fe/Cr/Fe для всех ориентаций поверхностной грани и толщин пленки железа является более энергетически выгодной перпендикулярная анизотропия, что наблюдается в эксперименте [10]. Для системы Fe/Pt/Fe выводы о преобладающей

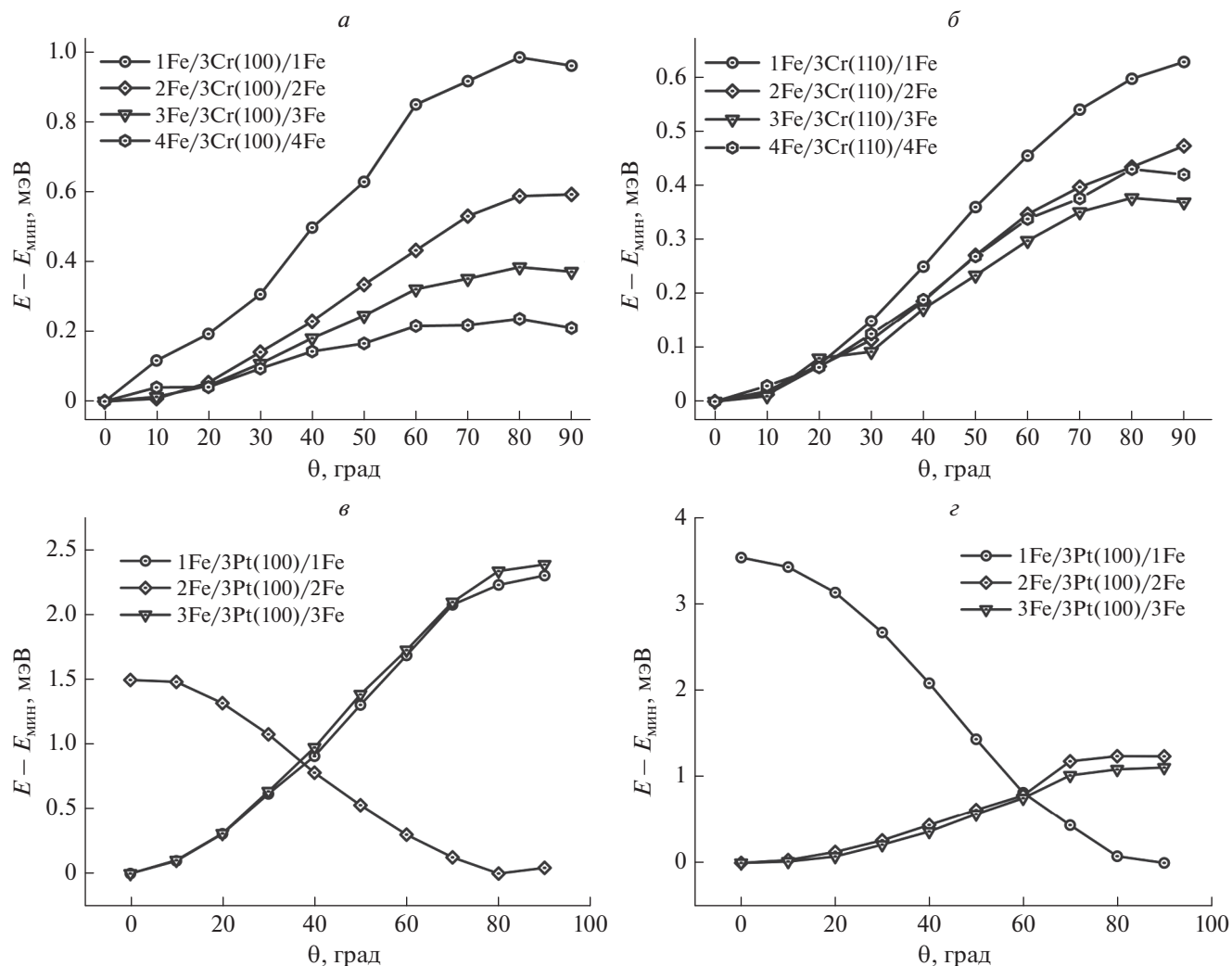


Рис. 2. Значение энергии магнитной анизотропии в зависимости от угла направления магнитного момента Θ в плоскости XZ для систем Fe/3Cr/Fe (*a*, *б*) и Fe/3Pt/Fe (*в*, *з*) с ориентацией поверхностных граней (100) и (110) при изменении толщины магнитной пленки.

Таблица 1. Значение энергии магнитной анизотропии ($E_{MA} < 0$ соответствует перпендикулярной конфигурации) в зависимости от толщины магнитной пленки Fe при толщине прослойки в 3 монослоя и ориентации поверхностной грани (100) и (110)

Кол-во монослоев Fe	Грань	E_{MA} , мЭВ	
		Fe/Cr/Fe	Fe/Pt/Fe
1	100	-0.984	-2.295
	110	-0.628	3.531
2	100	-0.592	1.447
	110	-0.473	-1.237
3	100	-0.384	-2.38
	110	-0.377	-1.108
4	100	-0.236	1.161
	110	-0.43	2.522

анизотропии соответствуют представленным на рис. 1б значениям, а по модулю значения E_{MA} в несколько раз больше, чем для Fe/Cr/Fe т. к. атомы Pt играют важную роль в магнитной анизотропии пленки Fe. Гибридизация с орбиталами Fe вызывает спиновую поляризацию на атоме Pt и, как следствие, усиливает E_{MA} из-за большой спин-орбитальной связи в атоме Pt.

Из результатов расчета магнитных моментов атома железа в зависимости от угла Θ , представленных в табл. 2, можно увидеть, что и намагниченность в пленке Fe на Pt выше, чем на Cr. Это обусловлено тем, что хром проявляет свойства послойного антиферромагнетика с противоположным направлением магнитного момента в слое ближайшем к пленке железа, что можно увидеть из представленных в табл. 3 значений магнитных моментов атома хрома.

Таблица 2. Значение проекции магнитного момента μ_x и μ_z атома Fe в монослойной пленке в зависимости от угла Θ для систем, 1Fe/3Pt(100)/1Fe и 1Fe/3Cr(100)/1Fe

Θ	μ_x, μ_B	μ_x, μ_B	μ_z, μ_B	μ_z, μ_B
	Fe/Cr/Fe	Fe/Pt/Fe	Fe/Cr/Fe	Fe/Pt/Fe
0	0	0	2.244	2.906
10	0.373	0.483	2.213	2.863
20	0.733	0.955	2.121	2.740
30	1.091	1.404	1.96	2.537
40	1.409	1.816	1.746	2.258
50	1.691	2.179	1.473	1.908
60	1.918	2.479	1.162	1.496
70	2.096	2.713	0.798	1.012
80	2.204	2.850	0.412	0.511
90	2.243	2.895	0	0

РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРА МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ

На основе полученных данных рассчитаем параметр анизотропии Δ . Воспользуемся гамильтонианом системы с анизотропией типа легкая плоскость и легкая ось:

$$H_{\parallel} = -\sum_{i,j} J_{i,j} \{S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta_{\parallel}) S_i^z S_j^z\}, \quad (1)$$

$$H_{\perp} = -\sum_{i,j} J_{i,j} \{(1 - \Delta_{\perp})(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z\}, \quad (2)$$

где S_i – трехмерный единичный вектор в узле i , J – характеризует обменное взаимодействие ближай-

Таблица 3. Значение магнитного момента μ_i атомов Cr при толщине прослойки в 3 монослоя и ориентации поверхностной грани (100) и (110) в зависимости от толщины магнитной пленки Fe

i	$N_{Fe} = 1$		$N_{Fe} = 2$	
	100	110	100	110
	μ, μ_B	μ, μ_B	μ, μ_B	μ, μ_B
1	-0.82	-0.22	-0.36	-0.25
2	0.79	0.06	0.18	0.07
3	-0.82	-0.22	-0.36	-0.25

ших спинов, носящее ферромагнитный характер, Δ – параметр анизотропии. Значение $\Delta = 0$ соответствует изотропной модели Гейзенберга, а $\Delta = 1$ – модели Изинга.

Из представленных выше гамильтонианов, выведем уравнение для нахождения Δ . Предположим, что все спины направлены вдоль оси x , тогда $S_i^x = S_j^x = S$; $S_i^y = S_j^y = 0$; $S_i^z = S_j^z = 0$. Подставим эти значения в (1) и получим:

$$E_x = -\sum_{i,j} J_{i,j} S^2. \quad (3)$$

Теперь направим спины вдоль оси z и, проделав аналогичные действия, получим:

$$E_z = -\sum_{i,j} J_{i,j} S^2 (1 - \Delta_{\parallel}). \quad (4)$$

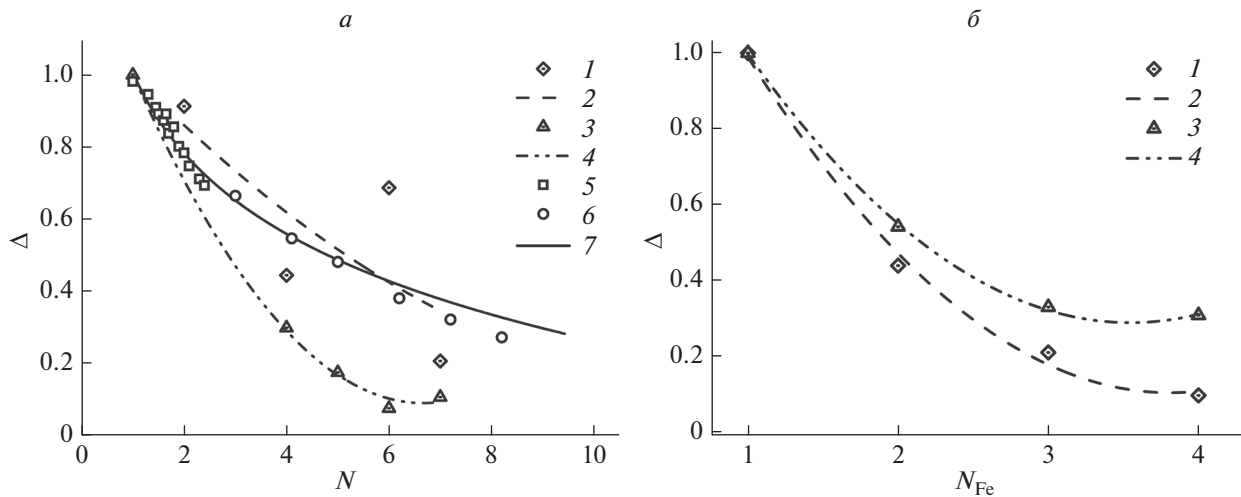


Рис. 3. Значения параметра анизотропии Δ в зависимости от толщины пленки, полученные для различных систем и их аппроксимация: Fe/Pt(100)/Fe (1, 2), Fe/Pt(110)/Fe (3, 4), значения $\Delta = 1 - \frac{T_c(N)}{T_c(\infty)}$ (5–7), при полученных из эксперимента $T_c(N)$ для Ni/Cu(100) и Co/Cu(100) [18] (a); Fe/Cr(100)/Fe (1–2); Fe/Cr(110)/Fe (3–4) (б).

Выведем параметр анизотропии из полученных уравнений:

$$\Delta_{\parallel} = 1 - \frac{E_z}{E_x} = \frac{E_x - E_z}{E_x}. \quad (5)$$

Аналогичным образом из (2) получаем

$$\Delta_{\perp} = 1 - \frac{E_x}{E_z} = \frac{E_z - E_x}{E_z}, \quad (6)$$

где Δ_{\parallel} соответствует гамильтониану типа легкая плоскость, а Δ_{\perp} гамильтониану типа легкая ось. Используя полученные ранее E_z и E_x , соответствующие значения полной энергии при направлении магнитных моментов атомов железа параллельно и перпендикулярно плоскости поверхности, получим Δ . Так как параметр анизотропии должен находиться в интервале от 0 до 1, а $E_{\text{МА}}$ максимальна для монослойной пленки, нормируем данные на значения Δ для монослоя. Результаты расчетов и их аппроксимация представлены на рис. 3. Можно заметить, что аппроксимация параметра анизотропии параболой имеет схожее поведение с результатами, полученными при аппроксимации [14] экспериментальных значений, для систем Ni/Cu(100) и Co/Cu(100) [18].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано явление магнитной анизотропии в пленках железа, разделенных прослойкой хрома и платины в зависимости от ориентации поверхностной грани и толщины слоев. Результаты показали, что перпендикулярная анизотропия для монослойных пленок железа с прослойкой из платины возникает только для грани (100) для всех толщин пластины Pt и для грани (110) для толщины пластины Pt в 5 монослоев. Для грани (111) при всех толщинах немагнитной прослойки более энергетически выгодна анизотропия типа легкая плоскость со значениями $E_{\text{МА}} = E_{\perp} - E_{\parallel} \approx 0.5-1.0$ мЭВ.

Для пленок толщиной в 1–3 моноатомных слоя было исследовано значение $E_{\text{МА}}$ при изменении угла направления вектора магнитного момента, от $\Theta = 0^\circ$ до $\Theta = 90^\circ$. Прослеживается плавное изменение значения $E_{\text{МА}}$ от значения угла. Показано, что для более тонких пленок, значение $E_{\text{МА}}$ выше, чем для пленок, состоящих из большего количества слоев. Для системы Fe/Cr/Fe перпендикулярная анизотропия при толщине прослойки в 3 моноатомных слоя возникает для всех ориентаций поверхностной грани. С увеличением толщины пленки абсолютное значение $E_{\text{МА}}$ уменьшается, а для прослойки из платины также меняется тип преобладающей анизотропии. С увеличением толщины пленки железа в системе Fe/Pt/Fe для всех ориентаций наблюдается преобладание

анизотропии типа легкая плоскость. И значение $E_{\text{МА}}$ и намагниченности для системы с прослойкой из платины значительно выше, чем у хрома.

Были рассчитаны значения параметра анизотропии Δ , аппроксимация которых имеет схожее с параболой поведение. Полученные нами результаты могут быть применены при численном моделировании методами Монте-Карло [1, 14] неравновесного поведения магнитных структур и расчетах коэффициента ГМС.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002). Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дроворуб Е.В., Прудников В.В., Прудников П.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 2. С. 158; Drovorub E.V., Prudnikov V.V., Prudnikov P.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Ser. Phys. 2022. V. 86. No. 2. P. 109.
2. Ennen I., Kappe D., Rempel T. et al. // Sensors. 2016. V. 16. P. 904.
3. Freitas P.P., Ferreira R., Cardoso S. et al. // J. Phys. Cond. Matter. 2007. V. 19. Art. No. 165221.
4. Николадзе Г.М., Матюнин А.В., Поляков П.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 11. С. 1559; Nikoladze G.V., Matyunin A.V., Polyakov P.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Ser. Phys. 2021. V. 85. No. 11. P. 1222.
5. Johnson M.T., Bloemen P.J., den Broeder F.J.A. et al. // Rep. Prog. Phys. 1996. V. 59. No. 11. P. 1409.
6. Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G. // Rep. Prog. Phys. 2008. V. 71. P. 51.
7. Mankovsky S., Ebert H. // Electron. Struct. 2022. V. 4. Art. No. 034004.
8. Gradmann U. // J. Magn. Magn. Mater. 1986. V. 54. P. 733.
9. den Broeder F.J.A., Hoving W., Bloemen P.J.H. // J. Magn. Magn. Mater. 1991. V. 93. P. 562.
10. Fritzsche H., Gradmann U. // MRS Proc. 1993. V. 313. P. 671.
11. Elmers H.J., Gradmann U. // Appl. Phys. A. 1990. V. 51. P. 255.
12. Etz C., Zabloudil J., Weinberger P., Vedmedenko E.Y. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Art. No. 184425.
13. Tsujikawa M., Hosokawa A., Oda T. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Art. No. 054413.
14. Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Mamonova M.V. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2019. V. 470. P. 201.
15. Kresse P. G., Furthmuller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. No. 11169.
16. Мамонова М.В., Макеев М.Ю., Калинин Д.С., Зенова А.А. // ФТТ. 2021. Т. 63. № 11. С. 1787.
17. Bornemann S., Siper O., Mankovsky S. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. Art. No. 104436.
18. Huang F., Kief M.T., Mankye G.J., Willis R.F. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. Art. No. 3962.

Investigation of magnetic anisotropy effects in trilayer metal nanostructures based on iron film

М. Ю. Makeev^a, М. В. Mamonova^{a, *}

^a Dostoevsky Omsk State University, Omsk, 644077 Russia

**e-mail: mamonovamv@omsu.ru*

Within the framework of the spin density functional theory, the energy and magnetic properties of Fe/Cr/Fe, Fe/Pt/Fe systems were studied using the VASP software package. Calculations of the dependence of the total energy on the angle of direction of the magnetic moment of atoms showed the advantage of perpendicular anisotropy for Fe/Cr/Fe for all considered Fe film thicknesses and surface orientations. For Fe/Pt/Fe, a more complex dependence is observed, but with an increase in the iron film thickness, easy-plane anisotropy prevails.