

УДК 538.9

СТАБИЛЬНОСТЬ СКИРМИОННОГО КРИСТАЛЛА В ФРУСТРИРОВАННОМ АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ БИСЛОЕ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

© 2023 г. И. Ф. Шарафуллин¹*, А. Г. Нугуманов¹, А. Х. Баишева¹, А. Р. Юлдашева¹, Х. Т. Диеп²

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Башкирский государственный университет”, Уфа, Россия

²Лаборатория теоретической физики и моделирования, Университет Сержи – Париж, Сержи – Понтуаз, Франция

*E-mail: SharafullinIF@yandex.ru

Поступила в редакцию 28.10.2022 г.

После доработки 15.11.2022 г.

Принята к публикации 26.12.2022 г.

Изучены процессы формирования и условия стабильности скирмионных решеток при термодинамических флуктуациях в магнитоэлектрических пленках, а именно, в фрустрированном антиферромагнитном/сегнетоэлектрическом бислое на треугольной решетке. С помощью адаптированного метода наискорейшего спуска вычислены конфигурации основного состояния с заданными параметрами. С помощью Монте-Карло моделирования исследовано влияние термодинамических флуктуаций, внешнего магнитного поля на конфигурации основного состояния, рассмотрены фазовые переходы, происходящие в рассматриваемой модели.

DOI: 10.31857/S0367676522700909, EDN: NOIGHX

ВВЕДЕНИЕ

Скирмионы в тонких ферромагнитных и антиферромагнитных пленках интенсивно исследуются в последние годы [1–8]. Их небольшой размер в диапазоне от 1 до 100 нм и очень слабый электронный ток около $106 \text{ A} \cdot \text{м}^{-2}$, необходимый для приведения их в движение [1, 9], делают их идеальными кандидатами для будущих устройств считывания и хранения данных. В работе [10, 11] авторы обнаружили, что для интерфейсов в бислоях состава Cr/MoS₂, Fe/MoS₂ и Fe/WSe₂ скирмионные решетки могут возникать при наличии сравнительно слабых взаимодействиях Дзялошинского–Мория в диапазоне экспериментально достижимых значений напряженности внешнего магнитного поля, при этом показано, что размеры скирмионов и магнитных вихрей резко меняются при возрастании внешнего магнитного поля. Уменьшение размеров скирмионов, повышение их устойчивости к комнатным температурам, а также снижение энергозатрат на управление скирмионами являются актуальными проблемами спинтроники. Одним из способов решения указанных проблем является использование искусственных антиферромагнетиков [12], в которых два ферромагнитных слоя связаны антиферромагнитно через немагнитный слой: в таких системах со-

гласно расчетам скирмионы меньше, стабильнее и требуют меньше энергии для манипуляций [13].

Экспериментальные фазовые диаграммы ряда материалов указывают на значительные переходные области между различными фазами (в том числе скирмионами и парамагнитными), что ставит задачу точного определения фазовых границ между скирмионами и геликоидальной структурой. В наноразмерных бислоях магнитоэлектрическое взаимодействие имеет определяющее значение для создания неколлинеарного дальнего спинового упорядочения [14, 15].

Настоящая работа посвящена поиску таких значений параметров взаимодействия и напряженности внешних полей в магнитоэлектрическом бислое, при которых нетривиальные топологические магнитные структуры устойчивы в основном состоянии.

МОДЕЛЬ

Рассмотрим бислой, состоящий из антиферромагнитной и сегнетоэлектрической нанопленки, обе пленки имеют структуру плоской треугольной решетки с одинаковой постоянной решетки. Гамильтониан запишем следующим образом

$$H = H_m + H_f + H_{mf},$$

где H_m и H_f – гамильтонианы антиферромагнитной и сегнетоэлектрической подсистем соответственно, а H_{mf} – гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух пленок. Опишем гамильтониан магнитной пленки с помощью спиновой модели Гейзенберга на простой треугольной решетке:

$$H_m = -\sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \times \vec{S}_j - \sum_i \vec{H} \times \vec{S}_i,$$

где \vec{S}_i – спин на i -м узле решетки, \vec{H} – внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости пленки вдоль оси z , $J_{ij}^m < 0$ параметр антиферромагнитного взаимодействия между спином и его ближайшими соседями, сумма берется по парам спинов ближайших соседей.

Предполагаем $J_{ij}^m < 0$ одинаковым, а именно J^m , для всех спинов магнитной пленки в плоскости. Для сегнетоэлектрической подсистемы, для простоты, мы предполагаем, что электрические поляризации являются единичными векторами, направленными в направлении $\pm z$. Гамильтониан подсистемы зададим в виде

$$H_f = -\sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \times \vec{P}_j,$$

где \vec{P}_i – поляризация i -го узла плоской треугольной решетки, $J_{ij}^f > 0$ – параметр взаимодействия между ближайшими соседями, сумма берется по соседним узлам. Аналогично антиферромагнитной подсистеме, мы возьмем одинаковое значение $J_{ij}^f = J^f$ для всех сегнетоэлектрических узлов. Гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух пленок зададим в виде

$$H_{mf} = \sum_{i,j,k} J_{ijk}^{mf} \vec{D}_{i,j} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j].$$

В этом выражении $J_{ijk}^{mf} \vec{D}_{i,j}$ играет роль вектора Дзялошинского–Мории, лежащего в плоскости xy .

Предположим для нашей модели $J_{ijk}^{mf} = J_{ij}^{mf} P_k$, J_{ijk}^{mf} – это параметр магнитоэлектрического взаимодействия (играет роль вектора Дзялошинского – Мории) между электрической поляризацией P_k на интерфейсном сегнетоэлектрическом слое и двумя ближайшими спинами \vec{S}_i и \vec{S}_j , на интерфейсном антиферромагнитном слое. Предполагаем, что величина $J_{ij}^{mf} = J^{mf}$ независима от (i,j) . Выражение для магнитоэлектрического взаимодействия тогда примет вид

$$H_{mf} = \sum_{i,j,k} J^{mf} P_k (\vec{R} \times \vec{r}_{i,j}) \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j].$$

Как можно видеть из последнего выражения параметр взаимодействия на интерфейсе пропорционален среднему значению $\langle P_k \rangle$, в свою очередь зависящему от T . Если $\langle P_k \rangle$ примет нулевое значение до разрушения скирмионной структуры, в этом случае скирмионная структура не формируется. Поэтому сегнетоэлектрическую пленку мы задаем моделью Изинга с параметром сегнетоэлектрического взаимодействия J^f , а поляризацию определяем Изинговским вектором, это связано с тем, что необходимо, чтобы температура перехода в сегнетоэлектрической пленке была выше, чем у магнитной подсистемы. Следует отметить, что переходы в магнитной подсистеме определяются конкуренцией между T и магнитным упорядочением (скирмионами), которое, в свою очередь, является результатом конкуренции между обменным взаимодействием, магнитоэлектрическим взаимодействием, (а именно $\langle P_k \rangle$) и внешним магнитным полем H . Предполагаем, что магнитоэлектрическое взаимодействие имеет место только для ближайших соседей.

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ

Для определения основного состояния спиновой конфигурации, нужно определить минимальную энергию системы. В самом простом случае ($J^m = J^f = 0$) минимум энергии достигается за счет того, что соседние спины, находящиеся в плоскости интерфейса перпендикулярны друг к другу, при отсутствии обменных взаимодействий (см. рис. 1).

Но с появлением обменного взаимодействия спины начинают образовывать неколлинеарную структуру за счет конкуренции коллинеарной конфигурации с перпендикулярной конфигурацией магнитоэлектрического взаимодействия.

Аналитический подсчет конфигурации основного состояния при наличии рассматриваемого числа конкурирующих взаимодействий является затруднительным, поэтому расчет основного состояния выполняется с помощью численного метода наискорейшего спуска. Этот метод является усовершенствованным методом градиентного спуска. Его преимущество заключается в большой скорости нахождения минимума функции, метод состоит в минимизации энергии всей системы, путем уменьшения энергии взаимодействия каждого спина с его ближайшими соседними узлами. Алгоритм заключается в следующем:

- 1) Задаем случайную спиновую конфигурацию.
- 2) За точку отсчета выбираем первый спин и для того чтобы энергия взаимодействия этого спина была минимальной, рассчитывается ло-

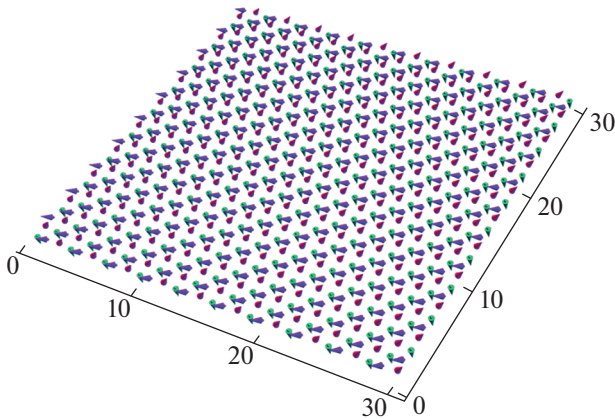


Рис. 1. Спиновая конфигурация основного состояния при наличии только магнитоэлектрического взаимодействия ($J^{mf} = -0.5$, $J^m = J^f = 0$) полученная численно методом наискорейшего спуска. Фиолетовая стрелка соответствует спином, расположенным в xy плоскости, красной стрелкой обозначены спины, направленные перпендикулярно xy плоскости вдоль оси oz ($+z$), зеленой стрелкой обозначены спины, направленные противоположно оси oz ($-z$).

кальное поле с учетом всех взаимодействий, действующих на данный спин.

3) Выравниваем рассматриваемый спин вдоль вычисленного локального поля. Таким образом,

достигается минимальное значение энергии взаимодействия спина с его ближайшими соседями.

4) Далее переходим к следующему узлу и повторяем эту процедуру до тех пор, пока мы не рассмотрим все узлы решетки (в работе рассматривались решетки размерами 60×60 , 100×100 , 400×400). Эти шаги повторяются до тех пор, пока полная энергия не станет минимальной – это одна итерация.

В работе представлены результаты моделирования, выполненные в результате 100000 итераций.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты расчетов основного состояния бислоя антиферромагнетик/сегнетоэлектрик на треугольной решетке в рамках рассматриваемой модели позволяют сделать вывод о том, что скирмионная решетка формируется при $J^m = -1$, $J^f = 1$ для следующего диапазона значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия $J^{mf} \in (-0.75, -0.35)$ и напряженности внешнего магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости бислоя в диапазоне $H \in (2, 4)$. На рис. 2 изображен пример такой структуры при $J^{mf} = -0.5$ и $H = 3.5$. Это срез бислоя с линейными размерами 120×120 , можем видеть, что скирмионы формируют решетку, причем каждая из

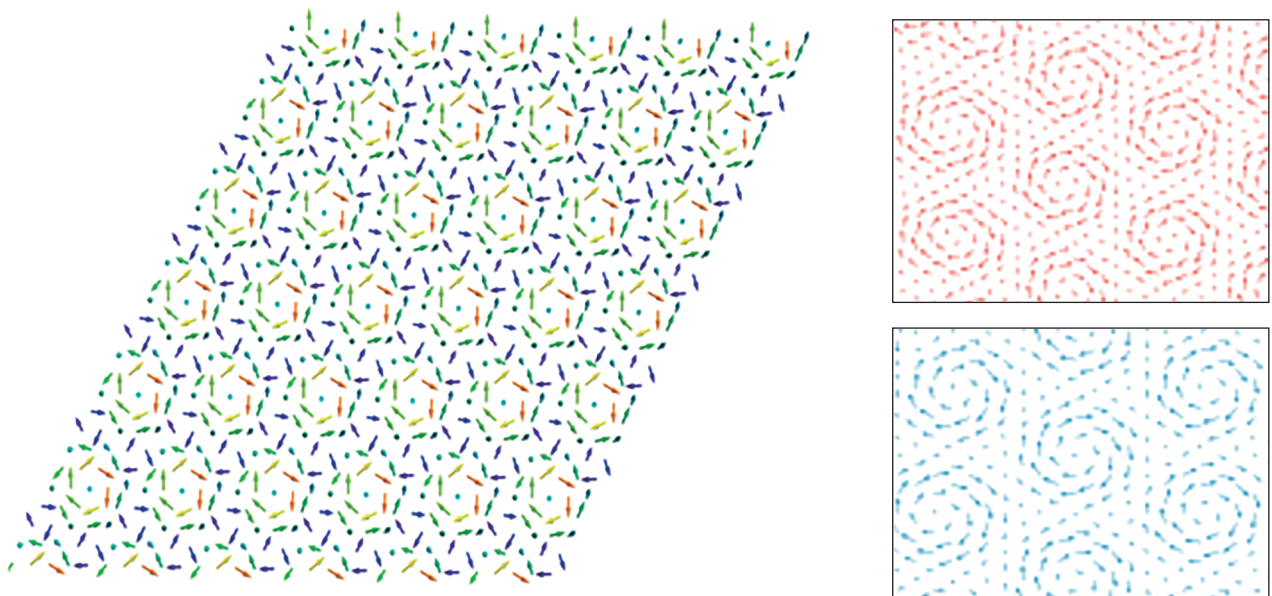


Рис. 2. Спиновая конфигурация основного состояния антиферромагнитного слоя с параметрами $J^{mf} = -0.5$ и $H = 3.5$, $J^m = -1$, $J^f = 1$, полученная численно методом наискорейшего спуска (слева). На правой половине рисунка представлена решетка скирмионов размером 60×60 узлов, красным цветом выделен скирмион с направлением спинов по часовой стрелке (скирмион меньшего радиуса на левом рисунке), синим цветом выделен скирмион с направлением спинов против часовой стрелки (скирмион большего радиуса на левом рисунке).

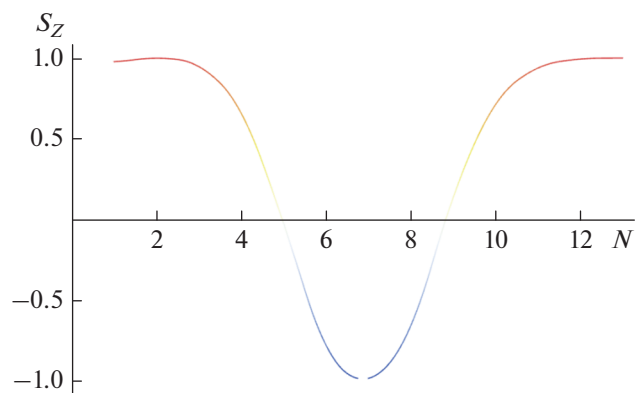


Рис. 3. Z -компоненты спинов вдоль диаметра скирмиона, при $J^{mf} = -0.5$ и $H = 3.5$, $J^m = -1$, $J^f = 0$.

скирмионных структур состоит из двух скирмионов с противоположным друг другу направлением вращения спинов. На рис. 3 показана зависимость Z -компоненты спина вдоль диаметра скирмиона. Результаты моделирования подтверждают, что спины за пределами вихря направлены вдоль внешнего поля, спин в центре вихря направлен противоположно внешнему полю, а вдоль диаметра скирмиона наблюдается разворот спина в плоскости, что подтверждает блоховскую скирмионную структуру (см. рис. 3). Результаты расчетов свидетельствуют о том, что при возрастании значения напряженности магнитного поля больше $H = 4$ скирмионная конфигурация основного состояния становится менее совершенной и затем исчезает при $H = 4.5$ для диапазона значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия $J^{mf} \in (-0.75, -0.35)$.

Для моделирования фазовых переходов и расчета динамики физических величин в зависимости от температуры в магнитоэлектрическом билосе методами Монте-Карло используем алгоритм Метрополиса. В основном расчеты проводятся для системы с размерами $N \times N \times 2$, где $N = 100$. Для достижения статистического равновесия на каждом узле алгоритм Метрополиса выполняет $5 \cdot 10^5$ Монте-Карло шагов и $9 \cdot 10^5$ Монте-Карло итераций на каждом узле для выполнения усреднения. Проследим за динамикой упорядочения системы от $T = 0$, поэтому мы должны сравнить конфигурацию при температуре T в момент времени t с конфигурацией основного состояния, исходя из которой осуществляется медленный нагрев системы при процедуре Монте-Карло моделирования.

Сравним фактическую конфигурацию, полученную при медленном нагреве с конфигурацией основного состояния, для этого выполним усред-

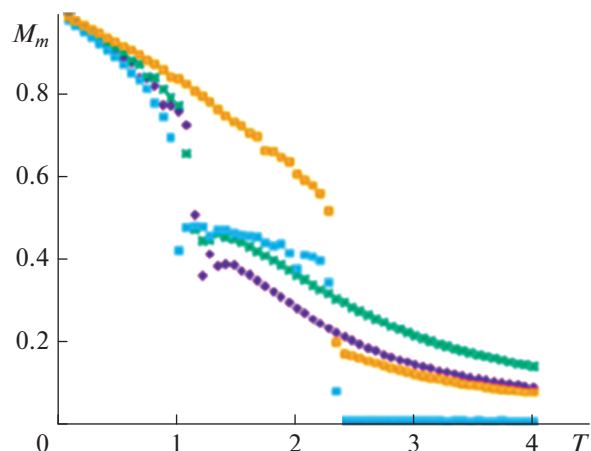


Рис. 4. Зависимость параметра порядка магнитной пленки от температуры T . Фиолетовые точки соответствуют: $J^{mf} = -0.45$, $H^z = 2$; зеленый цвет — $J^{mf} = -0.5$, $H^z = 2$; голубой цвет — $J^{mf} = -0.75$, $H^z = 2$; желтые точки — $J^{mf} = -0.5$, $H^z = 0$.

нение проекции фактической конфигурации на выбранное основное состояние спина на этом же узле $\bar{S}_i^0 (T = 0)$. На рис. 4 показаны температурные зависимости проекции усреднения скалярного произведения спиновой конфигурации при заданной температуре на спиновую конфигурацию основного состояния для различных значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия $J^{mf} = -0.40$, $J^{mf} = -0.50$, $J^{mf} = -0.75$, $J^{mf} = -0.85$, $H = 2.0$. После фазового перехода спины выравниваются в направлении поля, что приводит к ненулевым значениям параметра порядка после перехода (рис. 4).

Графики зависимостей параметра порядка магнитной пленки от температуры указывают на то, что при больших значениях J^{mf} в магнитной пленке происходят фазовые переходы первого рода при $T_C^m = 1.05$ для ($J^{mf} = -0.45$, $H^z = 2$) (фиолетовый график), при $T_C^m = 1.12$ для ($J^{mf} = -0.5$, $H^z = 2.0$) (зеленый график) и при $T_C^m = 1.25$ для ($J^{mf} = -0.75$, $H^z = 2$) (голубой график). В случае отсутствия внешнего магнитного поля, а именно для частного случая ($J^{mf} = -0.75$, $H^z = 0$) (желтый график), фазовый переход первого рода типа “порядок–беспорядок”, происходит при $T_C^m = 2.3$.

Остановимся на природе перехода, показанного на рис. 4. В случае наличия внешнего магнитного поля первый фазовый переход при температуре ($T \sim 1.05 - 1.25$) обусловлен разрушением упорядоченной скирмионной магнитной структуры. При дальнейшем повышении температуры скирмионы аннигилируют. После этого перехода z -компоненты векторов спина, не являющиеся нулевыми при воздействии внешнего поля, стремятся к нулю только при высоких $T \approx 2.3$, (результаты моделирования свидетельствуют о том, что при $T \approx 2.3$ происходит переход порядок-беспорядок в сегнетоэлектрическом слое). Отметим, что в случае отсутствия воздействия внешнего магнитного поля (желтый график), не происходит формирования скирмионов и, следовательно, при возрастании температуры не происходит фазового перехода, связанного с разрушением скирмионной структуры, но при $T_c^m = 2.3$ осуществляется фазовый переход из упорядоченной в разупорядоченную фазу, когда происходит одновременное разрушение магнитного и коллинеарного сегнетоэлектрического упорядочения. Происходящий переход первого рода объясняется тем, что рассматриваемая система является фрустрированной из-за наличия сильных конкурирующих взаимодействий.

Скирмионная решетка в фрустрированном антиферромагнитном/сегнетоэлектрическом бислое на треугольной решетке стабильна в большом диапазоне значений внешнего магнитного поля и в температурном диапазоне (0.95; 1.3). На данном этапе следует отметить, что приведенные выше результаты представлены в безразмерных единицах, а именно энергия в единицах обменного антиферромагнитного взаимодействия J^m , и температура в единицах J^m/k_B . Результаты работы могут быть использованы для сравнения материалов с различными значениями J^m . Например, если известно из экспериментальных данных [12], что фазовый переход, связанный с разрушением скирмионов происходит при $T_c^{exp} = 200$ К, мы можем вычислить эффективный обмен J^{eff} , используя, например, уравнение среднего поля

$$T_c^{exp} = \frac{2}{3k_B} ZS(S+1)J^{eff};$$

$$J^{eff} = 34.51 \times 10^{-23} \text{ Дж} = 47.63 \text{ К.}$$

Здесь принято, что $Z = 6$ для треугольной решетки, $S = 1$ (амплитуда спина), $k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23}$ Дж/К. J^{eff} представляет собой комбинацию обменного антиферромагнитного и магнитоэлектрического

взаимодействия. Зная основное состояние, и температуру перехода можно определить эти значения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, рассмотрены процессы формирования и условия стабильности скирмионной решетки при термодинамических флуктуациях в магнитоэлектрических пленках, а именно, в фрустрированном антиферромагнитном/сегнетоэлектрическом бислое на треугольной решетке. Рассматриваемая модель допускает существование устойчивой скирмионной решетки, с помощью математического моделирования установлены диапазоны значений параметров взаимодействия и напряженности внешнего магнитного поля в магнитоэлектрическом бислое, при которых нетривиальные топологические магнитные структуры устойчивы в основном состоянии.

С помощью адаптированного метода наискорейшего спуска вычислены конфигурации основного состояния с заданными параметрами. С помощью Монте-Карло моделирования исследовано влияние термодинамических флуктуаций, внешнего магнитного поля на конфигурации основного состояния, рассмотрены фазовые переходы, происходящие в рассматриваемой модели.

Ш.И.Ф., Н.А.Г, Б.А.Х, Ю.А.Р благодарят за финансовую поддержку в ходе данной работы государственное задание на выполнение научных исследований молодежными лабораториями (приказ MN-8/1356 от 20.09.2021).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Samardak A.S., Kolesnikov A.G., Davydenko A.V. et al. // Phys. Met. Metallogr. 2022. V. 123. P. 238.
2. Fert A., Reyren N., Cros V. // Nature Rev. Mater. 2017. V. 2. No. 7. Art. No. 17031.
3. Göbel B., Mertig I., Tretiakov O.A. // Phys. Reports. 2021. V. 895. P. 1.
4. Marchenko A.I. Krivoruchko V.N. // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 377. P. 153.
5. Sapozhnikov M.V. // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 396. P. 338.
6. Nagaosa N. Tokura Y. // Nature Nanotechnol. 2013. V. 8. No. 12. P. 899.
7. Manchon A., Železný J., Miron J. et al. // Rev. Mod. Phys. 2019. V. 91. No. 3. Art. No. 035004.
8. Sharafullin I.F., Kharrasov M.K., Diep H.T. // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. No. 21. Art. No. 214420.
9. Ding J., Yang X., Zhu T. // J. Phys. D. 2015. V. 48. No. 11. Art. No. 115004.
10. Fang W., Raeliarijaona A., Chang P.H. et al. // Phys. Rev. Mater. 2021. V. 5. No. 5. Art. No. 054401.
11. Heide M., Bihlmayer G., Blügel S. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. No. 14. Art. No. 140403(R).

12. Zhang X., Zhou Y., Ezawa M. // Nature Commun. 2016. V. 7. No. 1. P. 1.
13. Zhang X., Ezawa M., Zhou Y. // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. No. 6. Art. No. 064406.
14. Шарафуллин И.Ф., Дьен Х.Т. // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114. № 9. С. 610; Sharafullin I.F., Diep H.T. // JETP Lett. 2021. V. 114. No. 9. P. 536.
15. Nugumanov A.G., Sharafullin I.F. // Lett. Mater. 2022. V. 12. No. 2. P. 116.

Stability of a skyrmion crystal in a frustrated antiferromagnetic bilayer on a triangular lattice

I. F. Sharafullin^{a, *}, A. G. Nugumanov^a, A. H. Baisheva^a, A. R. Yuldasheva^a, H. T. Diep^b

^a Bashkir State University, Ufa, 450076 Russia

^b Laboratoire de Physique Theorique et Modelisation, Université Cergy-Paris, CNRS, Cergy-Pontoise, UMR 8089, 95302 France

*e-mail: SharafullinIF@yandex.ru

We studied the processes of formation and conditions of stability of skyrmion lattices during thermodynamic fluctuations in magnetoelectric films, namely, in a frustrated antiferromagnetic/ferroelectric bilayer on a triangular lattice. We calculate the ground state configurations with given parameters using the steepest descent method. We consider the thermodynamic fluctuations in influence of an external magnetic field on the ground state configurations and phase transitions occurring in the model using Monte Carlo simulation.