

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Влияние плотности дефектов интерфейса на поле обменного смещения в бислойной системе ферромагнетик/антиферромагнетикС. В. Белим^{1,2, а}¹ Омский государственный технический университет. Россия, 644050, Омск, пр. Мира, д. 11.² Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет (СибАДИ).

Россия, 644080, Омск, пр. Мира, д. 5.

Поступила в редакцию 03.03.2021, после доработки 11.04.2021, принята к публикации 26.04.2021.

Методом компьютерного моделирования исследовано влияние дефектов интерфейса на величину поля обменного смещения в бислойной системе ферромагнетик/антиферромагнетик. Изучен случай тонкой ферромагнитной пленки на толстой антиферромагнитной подложке. Исследование проведено в рамках модели Изинга. Использован алгоритм Метрополиса. Дефекты поверхности подложки моделируются как случайные точечные немагнитные примеси. Поле обменного подмагничивания определяется по смещению петли гистерезиса. Получена зависимость поля обменного подмагничивания от концентрации дефектов на поверхности подложки при различных температурах.

Ключевые слова: фазовые переходы, критические явления, диполь-дипольное взаимодействие.

УДК: 537.621.3. PACS: 68.35.Rh.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время спинтроники становится основой развития новых электронных устройств, использующих спиновые клапаны. Устройства спинтроники базируются на эффектах гигантского магнитосопротивления и туннельного магнитосопротивления. Устройства на основе спиновых клапанов в основном включают в себя свободный слой ферромагнетика и закрепленный слой. Закрепление слоя реализуется с помощью эффекта обменного смещения между ферромагнитным слоем и антиферромагнитным слоем [1, 2]. Эффект обменного смещения возникает на границе раздела между ферромагнетиком (F) и антиферромагнетиком (AF) при охлаждении системы ниже температуры Нееля [3–5]. Обменное смещение проявляется в виде магнитного поля смещения, приводящего к изменению петли гистерезиса [6, 7]. Возможны два эффекта, вызванных полем обменного смещения. Прежде всего, возможен сдвиг петли гистерезиса вдоль направления внешнего поля. Также поле обменного смещения может приводить к увеличению коэрцитивности, проявляющейся как увеличение ширины петли гистерезиса [6, 7]. Феноменологические теории обменного смещения были предложены на основе модели грубого F–AF интерфейса [8], модели состояния домена [9] и с учетом роли некомпенсированных спинов [10, 11]. В последние годы материалы, демонстрирующие эффект обменного смещения, активно исследуются благодаря их применению в магнитных считывающих головках [12], датчиках и биосенсорах [13, 14], спинтронных устройствах [15, 16].

Возникновение поля обменного смещения является эффектом, проявляющимся на границе материалов. Поэтому его значение зависит от плотности магнитных дефектов на границе соприкосновения материалов. Большое количество экспериментальных работ [18–21] показывает, что наличие дефектов на интерфейсе пленки и подложки приводит к сниже-

нию поля обменного смещения. Однако теоретически этот вопрос исследован недостаточно. В данной работе проведено изучение влияния дефектов поверхности подложки на величину поля обменного смещения методом компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование эффекта обменного смещения сталкивается с проблемой получения петли гистерезиса в компьютерном эксперименте. Для этой цели может быть использован метод Монте-Карло. Этот метод позволяет осуществлять микроскопическое описание состояния системы спинов, соответствующих магнитным материалам. Также он позволяет описывать модификацию системы при изменении термодинамических условий. На сегодняшний день используются два основных типа алгоритмов для моделирования спиновых систем: алгоритм Метрополиса и кластерные алгоритмы. Кластерные алгоритмы Вольфа и Свендсена–Вана [22–24] основаны на поиске нового состояния для больших доменов, состоящих из одинаково ориентированных спинов. Этот подход не позволяет получать петлю гистерезиса, так как при вычислении нового состояния системы полностью теряется информация о предыдущем состоянии. Алгоритм Метрополиса [25] основан на поиске нового состояния для отдельно взятого спина, что позволяет изучать метастабильные и переходные состояния системы и получать петли гистерезиса. В статье [26] осуществлено тестирование алгоритма Метрополиса при вычислении петли гистерезиса для трехмерных систем, описываемых моделью Гейзенберга. В этой работе определено количество шагов Монте-Карло на спин, необходимое для перехода в новое состояние, которое позволяет изучать особенности поведения системы, а не ее модели.

Алгоритм для расчетов квазистатических петель гистерезиса методом Монте-Карло был предложен в статье [27]. Основная идея этого алгоритма состоит в вычислении вероятности переворачивания одного спина в зависимости от начальной энергии, конечной энергии и положения седловой точки.

^а E-mail: sbelim@mail.ru

В статье [28] проведено компьютерное моделирование двухслойной системы, состоящей из пленки Fe на подложке FeF₂. Показано, что наличие некомпенсированных спинов на антиферромагнитном интерфейсе приводит к снижению величины поля обменного взаимодействия. В этих работах показано, что явление обменного смещения для модели Гейзенберга проявляется в изменении коэрцитивного поля. Моделирование обменного смещения в бислойных системах в рамках модели Изинга было выполнено в работах [29–31].

Целью данной статьи является исследование влияния дефектов интерфейса между ферромагнитной и антиферромагнитной пленки на величину поля обменного смещения в бислойной системе методом компьютерного моделирования.

1. ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ

Для исследования поля обменного подмагничивания рассмотрим систему, состоящую из тонкой ферромагнитной пленки на полубесконечной антиферромагнитной подложке. Эта модель соответствует технологиям, используемым в устройствах спинтроники. Толщина антиферромагнетика значительно превышает толщину ферромагнитной пленки для того, чтобы избежать обратного влияния ферромагнитного упорядочивания на состояние антиферромагнетика. При величине внешнего магнитного поля, превышающей пороговое значение, антиферромагнитный фазовый переход не наблюдается. Если рассматривать полубесконечную антиферромагнитную подложку, то этим влиянием можно пренебречь. Выберем ферромагнитную пленку, имеющую D спиновых слоев. Оси координат выберем так, чтобы поверхность антиферромагнетика, на которую нанесена пленка, была перпендикулярна оси OZ и описывалась уравнением $z = D$. Антиферромагнитная подложка будет располагаться в области $z \geq D$. Свободная поверхность ферромагнитной пленки будет описываться уравнением $z = 0$. Для описания состояния спинов используем модель Изинга. В рамках этой модели каждый спин S может принимать одно из двух значений $S = 1/2$ или $S = -1/2$. В ферромагнитной пленке взаимодействие спинов описывается обменным интегралом J_0 ($0 < z < D$). В качестве подложки будем использовать слоистый антиферромагнетик. Если спины лежат в одной плоскости, то обменный интеграл взаимодействия между ними J_a ; если в соседних плоскостях, то обменный интеграл равен $-J_a$. Таким образом, спинам в одном слое энергетически выгодно упорядочиваться в одном направлении, а спинам в соседних слоях — в противоположных направлениях.

На границе соприкосновения ферромагнетика и антиферромагнетика также присутствует обменное взаимодействие, которое носит ферромагнитный характер с обменным интегралом J . Исследовались системы с гладкой поверхностью соприкосновения, а также системы с поверхностью антиферромагнетика, содержащей немагнитные дефекты. Присутствие дефектов задавалась на поверхности антиферромагнетика путем исключения отдельных спинов. Концентрация отсутствующих спинов определялась

параметром p ($0 \leq p \leq 1$). Отсутствующие спины определялись случайным образом. Задавалось n_p конфигураций отсутствующих спинов с последующим усреднением термодинамических параметров системы.

Запишем гамильтониан такой системы во внешнем магнитном поле h_0 :

$$H = -J_0 \sum_{0 < z < D} S_i S_j + J_a \sum_{z > D} (-1)^\sigma S_i S_j - J \sum_{z=D} M(p) S_i S_j + \mu_0 h_0 \sum S_i.$$

Здесь S_i — значение спина в i -м узле, h_0 — напряженность магнитного поля, μ_0 — магнетон Бора, σ — параметр, определяющий знак взаимодействия в антиферромагнитной подложке, $\sigma = 1$ для пары спинов в одной плоскости, $\sigma = 0$ для пары спинов в соседних плоскостях. В первых трех слагаемых учитывается взаимодействие только ближайших соседей. В третьем слагаемом один спин из ферромагнитной пленки, а второй из антиферромагнитной подложки. $M(p)$ — случайная функция с равномерным распределением. С вероятностью p выполняется равенство $M(p) = 0$. В остальных случаях $M(p) = 1$. Функция $M(p)$ моделирует дефекты поверхности соприкосновения ферромагнитной пленки с подложкой, сводящиеся к отсутствию отдельных атомов.

При компьютерном моделировании удобней работать с относительными величинами.

$$R_a = J_a/J_0, \quad R = J/J_0, \quad h = \mu h_0/J_0, \quad T = kt/J_0,$$

t — температура системы, k — постоянная Больцмана, T — приведенная температура.

Запишем гамильтониан в приведенных величинах.

$$H/J_0 = - \sum_{0 < z < D} S_i S_j + R_a \sum_{z > D} (-1)^\sigma S_i S_j - R \sum_{z=D} M(p) S_i S_j - h \sum_{0 < z < D} S_i.$$

В качестве параметра порядка ферромагнитной пленки будем использовать суммарный спин на одну частицу

$$m = \left(\sum_{0 < z < D} S_i \right) / N,$$

N — общее количество спинов в ферромагнитной пленке.

Параметр порядка для антиферромагнитной подложки вычислялся как отношение разности намагниченности четных и нечетных спиновых слоев к числу частиц

$$m_a = \left(\sum_{z \geq D, \text{ odd}} S_i - \sum_{z \geq D, \text{ even}} S_i \right) / N_a.$$

N_a — общее количество частиц в системе спинов, моделирующих антиферромагнитную подложку. Эффект полубесконечности достигается с помощью периодических граничных условий.

Поле обменного подмагничивания наблюдается, если пленка находится в ферромагнитной фазе, а подложка — в антиферромагнитной. Для этого температура системы должна быть ниже как температуры Кюри пленки, так и температуры Нееля подложки. Для обеих составляющих системы были определены температуры фазовых переходов. Для этого использовались куммулянты Биндера четвертого порядка [15]:

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad U_a = 1 - \frac{\langle m_a^4 \rangle}{3\langle m_a^2 \rangle^2}.$$

При вычислении куммулянтов Биндера выполняется термодинамическое усреднение по состояниям системы, которое обозначено угловыми скобками. Температуры фазовых переходов определялись на основе точки пересечения графиков зависимости куммулянтов Биндера от температуры для систем различного линейного размера L [15]. Для определения температуры Кюри T_C строились графики для куммулянтов U , для определения температуры Нееля T_N — графики куммулянтов U_a .

Температуре фазового перехода соответствует точка пересечения куммулянтов Биндера при различных значениях линейных размеров системы. При реализации подобных систем материалы выбираются таким образом, чтобы температура Нееля T_N была ниже температуры Кюри T_C . Температура фазового перехода определяется в единицах обменного интеграла соответствующей составляющей системы. Для того, чтобы выполнялось равенство $T_N < T_C$, при моделировании необходимо выбирать $R_a < 1$. Кроме того, на температуру фазового перехода влияет толщина пленки.

В компьютерном моделировании исследовались ферромагнитные пленки с линейными размерами $L \times L \times D$. Пленка располагалась вдоль плоскости $z = 0$. На границе пленки задавались периодические граничные условия. Для исследования подложки использовалась антиферромагнитная система с линейными размерами $L \times L \times 2L$. Сторона с большими размерами располагалась вдоль оси OZ . По направлениям осей OX и OY использовались обычные периодические граничные условия. Вдоль оси OZ , для спинов, расположенных в плоскости $z = 2L$, соседними считались спины из плоскости $z = L$. Спины, расположенные в плоскости $z = 1$, взаимодействовали со спинами ферромагнитной пленки. Для расчета петель гистерезиса использовался алгоритм Метрополиса [25]. Более эффективные для расчета критического поведения кластерные Вольфа [22] и Свендсена—Янга [23, 24] не могут быть использованы при исследовании гистерезиса, так как полностью стирают информацию о предыдущем состоянии системы.

Построение петли гистерезиса начиналось с приведения системы в равновесное состояние при значении магнитного поля $h_{\max}$. Для этого осуществлялось n_0 шагов Монте-Карло. После этого внешнее магнитное поле последовательно уменьшалось с шагом Δh до достижения значения $-h_{\max}$. После этого магнитное поле вновь последовательно увеличивалось с шагом Δh до достижения значения $h_{\max}$. При каждом значении магнитного поля выполнялось n_1 шагов

Монте-Карло для поиска нового состояния системы. Распределение спинов при предыдущем значении магнитного поля служило начальным состоянием для следующего значения магнитного поля. Количество шагов Монте-Карло n_1 выбиралось значительно меньше n_0 для того, чтобы новое состояние системы зависело от предыдущего состояния системы. Такой подход позволяет моделировать коэрцитивные силы. Для каждого полученного состояния вычислялась проекция намагниченности ферромагнитной пленки на направление внешнего магнитного поля. После чего строился график зависимости проекции магнитного момента от величины внешнего магнитного поля.

Построение петли гистерезиса было выполнено для различных температур системы, не превышающих точки Кюри ($T < T_C$). Первая петля гистерезиса строилась для температуры, превышающей температуру Нееля ($T > T_N$). В этом случае подложка находится в парамагнитной фазе и не создает поле обменного смещения. После этого температура устанавливалась ниже точки антиферромагнитного фазового перехода подложки и строилась новая петля гистерезиса. По смещению центра петли гистерезиса определялось значение поля обменного смещения.

Моделирование функции $M(p)$, определяющей дефекты поверхности, осуществлялось с помощью генератора случайных чисел. Задавалось значение процента отсутствующих спинов p . После этого с помощью генератора случайных чисел с равномерным распределением формировалось состояние поверхности подложки. На слое подложки, граничащем с пленкой, случайным образом исключалось pL^2 спинов. Количество таких состояний было равно n_p . Для каждого состояния проводилось построение петли гистерезиса. После этого производилось усреднение по всем состояниям поверхности подложки. Сначала система исследовалась при $p = 0$, что соответствует гладкой поверхности. После этого значение p увеличивалось с шагом Δp до значения $p = 1$. Значение параметра $p = 1$ соответствует полному отсутствию взаимодействия пленки с подложкой.

2. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В компьютерном эксперименте исследовалась ферромагнитная пленка толщиной $D = 4$. Как показано в статье [7], значение поля обменного смещения обратно пропорционально толщине пленки и, если оно известно для одного значения толщины пленки, то может быть вычислено для остальных значений. Сначала вычислялись температуры фазовых переходов для пленки и подложки. Для этого исследовались системы с линейными размерами от $L = 20$ до $L = 40$ с шагом $\Delta L = 4$. Для отношения обменных интегралов было выбрано значение $R_a = 0.6$. Такое значение обеспечивает достаточный зазор между температурой Кюри пленки и температурой Нееля подложки. Эти параметры моделирования привели к значениям температур фазовых переходов $T_C = 3.83$ и $T_N = 2.71$. Дальнейшие исследования проводились в интервале температур от $T = 1.5$ до $T = 3.3$ с шагом $\Delta T = 0.1$. Построение петли гистерезиса выполнялось для систем с линейным размером $L = 40$.

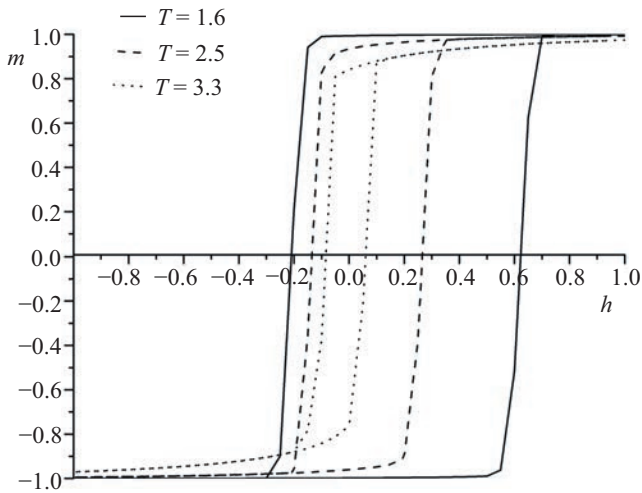


Рис. 1. Положение петли гистерезиса при различных температурах для $p = 0.0$

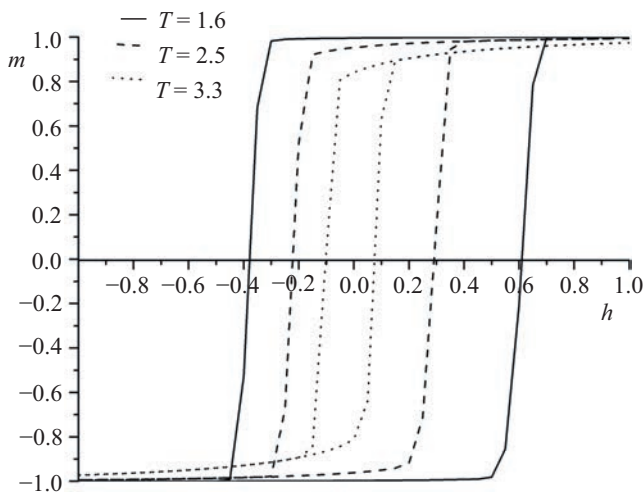


Рис. 2. Положение петли гистерезиса при различных температурах для $p = 0.5$

Поле обменного смещения прямо пропорционально обменному интегралу на границе соприкосновения пленки и подложки [7]. При компьютерном моделировании было выбрано значение $R = 1.0$. Это значение обеспечивает максимальное значение обменного смещения. При необходимости расчета систем с меньшим значением обменного интеграла на границе двух сред, поле обменного смещения уменьшается пропорционально значению R . Для построения петли гистерезиса использовались значение максимального магнитного поля $h_{\max} = 2.0$ и шаг $\Delta h = 0.01$. Для концентрации дефектов поверхности использовался шаг $\Delta p = 0.1$. На рис. 1 представлено смещение петли гистерезиса при изменении температуры для гладкой поверхности соприкосновения пленки и подложки ($p = 0$). Аналогичное смещение петли гистерезиса при понижении температуры для параметра концентрации дефектов $p = 0.5$ представлено на рис. 2.

Как видно из рис. 1 и 2 наличие дефектов поверхности приводит уменьшению величины обменного смещения петли гистерезиса. Это уменьшение связано со снижением полной энергии взаимодействия спинов на границе соприкосновения пленки

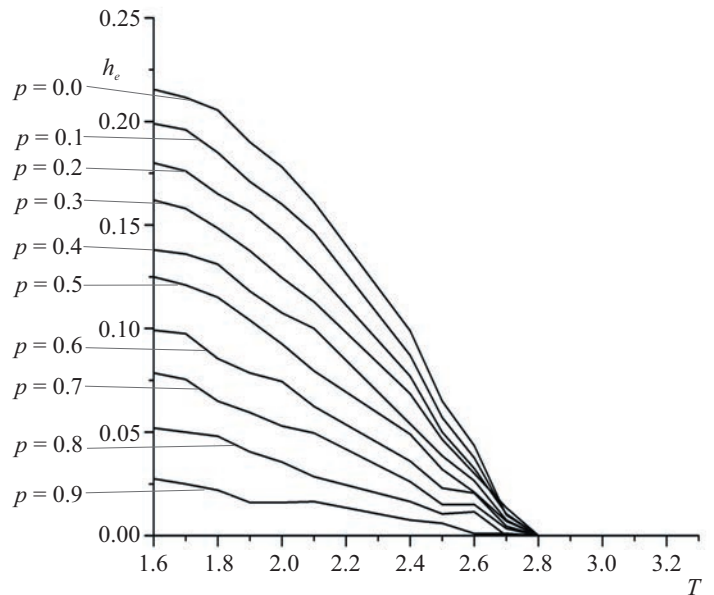


Рис. 3. Зависимость поля обменного смещения h_e от температуры при различных значениях параметра шероховатости p

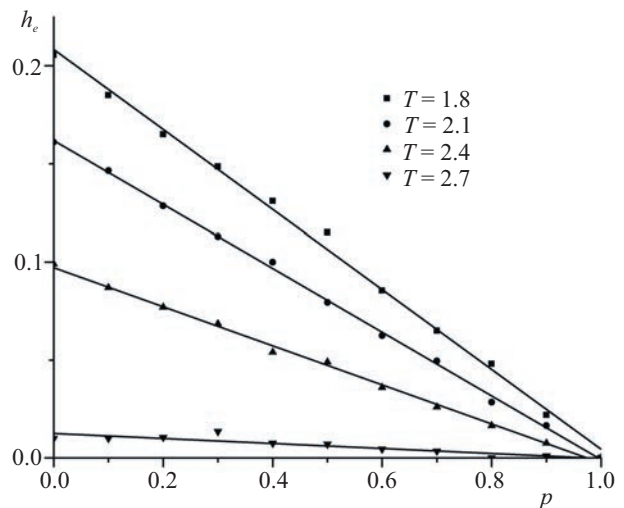


Рис. 4. Зависимость поля обменного смещения h_e от параметра шероховатости p при различных значениях температуры

и подложки из-за отсутствия части спинов на поверхности антиферромагнитной подложки. На рис. 3 представлена зависимость поля обменного смещения h_e от температуры T при различных значениях параметра концентрации дефектов поверхности p . Эта зависимость может быть аппроксимирована линейной функцией:

$$h_e = a(p)T + b(p).$$

Анализ линейных функций аппроксимации показал, что для всех значений параметра концентрации дефектов p выполняется равенство $b(p) = -a(p)$. Отклонение от этого равенства не превышает 4%. Зависимость значений коэффициента a от параметра концентрации дефектов поверхности p может быть аппроксимирована квадратичной функцией

$$a(p) = (0.044 \pm 0.002)p^2 - (0.354 \pm 0.011).$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, исследования влияния дефектов поверхности, проведенные методом компьютерного моделирования, подтвердили чувствительность поля обменного смещения к качеству интерфейса антиферромагнитной подложки и ферромагнитной пленки. Полученные закономерности согласуются с данными экспериментальных исследований. В статье [18] экспериментально исследовано влияние дефектов границы ферромагнетик/антиферромагнетик на поведение петли гистерезиса бислойной системы NiFe/FeMn. Величина дефектов интерфейса пленок регулируется путем введения на их границе слоя Ta, который снижает влияние дефектов структуры. Экспериментальные данные показывают уменьшение величины поля обменного смещения и увеличение ширины петли гистерезиса при снижении количества дефектов на границе соприкосновения пленок. В статье [19] проведено исследование поля обменного смещения для бислойной пленки MnN/CoFe. Эксперименты показали, что образование на границе пленок примесной фазы антиферромагнетика приводит к снижению как поля обменного смещения, так и коэрцитивной силы. В работе [20] исследованы бислойные системы NiFe/IrMn. Основной целью статьи ставится определение величины обменного взаимодействия на границе пленок. Показано, что наличие немагнитных примесей на поверхности антиферромагнетика приводит к пониженному значению обменного смещения. В статье [21] показано, что присутствие 5% примесей может приводить к уменьшению значения поля обменного смещения более чем на 50%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-07-00053).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chappert C., Fert A., Van Dau N. // *Nature Mater.* 2007. **6**. P. 813.
2. Meinert M., Boker B., Graulich D., Dunz M. // *Phys. Rev. B.* 2015. **92**. P. 144408.
3. Kiwi M. // *J. Magn. Magn. Mater.* 2001. **234**. P. 584.
4. Nogues J., Sort J., Langlais V. et al. // *Physics Reports.* 2005. **422(3)**. P. 65.

5. Nogues J., Schuller I. K. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1999. **192**. P. 203.
6. Scholten G., Usadel K., Nowak U. // *Physical Review B.* 2005. **71(6)**. P. 1.
7. Berkowitz A. E., Kentaro T. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1999. **200**. P. 552.
8. Malozemoff A. P. // *Phys. Rev. B.* 1987. **35**. P. 3679.
9. Miltonyi P., Gierlings, M., Keller J. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2000. **84**. P. 4224.
10. Ge C., Wan X., Pellegrin E. et al. // *Nanoscale* 2013. **5**. P. 10236.
11. Takano K., Kodama R. H., Berkowitz A. E. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. **79**. P. 1130.
12. Parkin S., Jiang X., Kaiser C. et al. // *Proc. IEEE* 2003. **91**. P. 661.
13. Negulescu B., Lacour D., Montaigne F. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2009. **95**. P. 112502.
14. Ehresmann A., Koch I., Holzinger D. // *Sensors* 2015. **15**. P. 28854.
15. Nguyen T. N. A., Fang Y., Fallahi V. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2011. **98**. P. 172502.
16. Polenciuc I., Vick A. J., Allwood D. A. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2014. **105**. P. 162406.
17. Meiklejohn W. H. // *J. Appl. Phys.* 1962. **33(3)**. P. 1328.
18. Chang H. W., Yuan F. T., Chiang M. T. et al. // *Surf. Coat. Technol.* 2016. **303**. P. 148.
19. Chang H. W., Chien Y. H., Yuan F. T. et al. // *AIP Advances.* 2020. **10**. P. 025035.
20. Mishra S. K., Radu F., Valencia S. et al. // *Phys. Rev. B.* 2010. **81**. P. 212404.
21. Aley N. P., Bonet C., Lafferty B., O'Grady K. // *IEEE Trans. Magn.* 2009. **45(10)**. P. 3858.
22. Wolff U. // *Phys. Lett. B.* 1989. **228**. P. 379.
23. Swendsen R. H., Wang J. S. // *Phys. Rev. Lett.* 1987. **58**. P. 86.
24. Wang J. S., Swendsen R. H. // *Phys. A.* 1990. **167**. P. 565.
25. Landau D. P., Binder K. // *Phys. Rev. B.* 1978. **17**. P. 2328.
26. Nehme Z., Labaye Y., Sayed Hassan R. et al. // *AIP Advances.* 2015. **5**. P. 127124.
27. Du H. F., Du A. // *J. Appl. Phys.* 2006. **99**. P. 104306.
28. Billoni O. V., Cannas S. A., Tamarit F. A. // *J. Phys. Condens. Matter.* 2011. **23(38)**. P. 386004.
29. Belim S. V. // *Letters on Materials.* 2020. **10(3)**. P. 272.
30. Belim S. V., Larionov I. B. // *Journal of Physics: Conference Series.* 2020. **1546**. P. 012111.
31. Belim S. V., Belim S. S. // *Journal of Physics: Conference Series.* 2020. **1697**. P. 012098.

The Effect of Interface Inhomogeneity on an Exchange Bias Field in a Ferromagnet/Antiferromagnet Bilayer System

S. V. Belim

Omsk State Technical University. Omsk 644050, Russia.

Siberian State Automobile and Highway University. Omsk 644080, Russia.

E-mail: sbelim@mail.ru.

The effect of interface inhomogeneity on the exchange bias field value in the ferromagnet/antiferromagnet bilayer system is investigated by computer simulation. The case of a thin ferromagnetic film on a thick antiferromagnetic substrate is studied. The Ising model and Metropolis algorithm are used for research. The inhomogeneity of the substrate surface is modeled as random point nonmagnetic impurities. The exchange bias field is determined by the hysteresis loop offset. The dependence of the exchange bias field on the concentration of impurities on the substrate surface at different temperatures is calculated.

Keywords: phase transition, critical phenomena, dipole–dipole interaction.

PACS: 68.35.Rh.

Received 03 March 2021.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2021. **76**, No. 4. Pp. 215-220.

Сведения об авторе

Белим Сергей Викторович — доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (3812) 65-22-92, e-mail: sbelim@mail.ru.