Моделирование методом Монте-Карло критических свойств усложненного спинового вентиля

Егорина Анастасия Сергеевна, Прудников Павел Владимирович

anastasia.sergeevna.egorina@gmail.com

Кафедра теоретической физики
Направление «Прикладные математика и физика»
Лаборатория теоретической физики, прикладного моделирования
и параллельных вычислений

24 апреля 2022 г.

Цели исследования

- Исследование критического поведения спиновых систем и термодинамических характеристик, описывающих критическое поведение.
- Моделирование неравновесного поведения усложненного спинового вентиля, описываемого трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось».
- Изучение временной зависимости намагниченности в усложненном спиновом вентиле. Анализ влияния величины внешнего магнитного поля на релаксацию намагниченности. Выявление эффектов старения.

Актуальность

Физика ультратонких магнитных пленок с толщинами от одного-двух атомных слоев до нескольких десятков слоев является направлением интенсивных научных исследований в течении последних лет[1]. Повышенный интерес ученых вызван целым рядом уникальных свойств пленок, отличающихся от свойств объемных материалов, что обуславливает важность этих новых объектов как для развития фундаментальных основ физики магнетизма и физики поверхности, так и для практического приложения[2].

[1] Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures, Rep. Prog. Phys. 2008. Vol. 71 056501.

[2] В.В. Прудников,П.В. Прудников, М.В. Мамонова, М.А. Медведева, Теоретические методы описания критических свойств ультратонких пленок: монография. - Омск : Изд-во Ом.гос. ун-та, 2016.- 138 с.

Актуальность

Ультратонкие пленки из магнитных металлов и сплавов являются составляющими элементами магнитных спин-вентильных структур, которые активно применяются в устройствах с эффектами гигантского магнитосопротивления(ГМС)[3], [4].

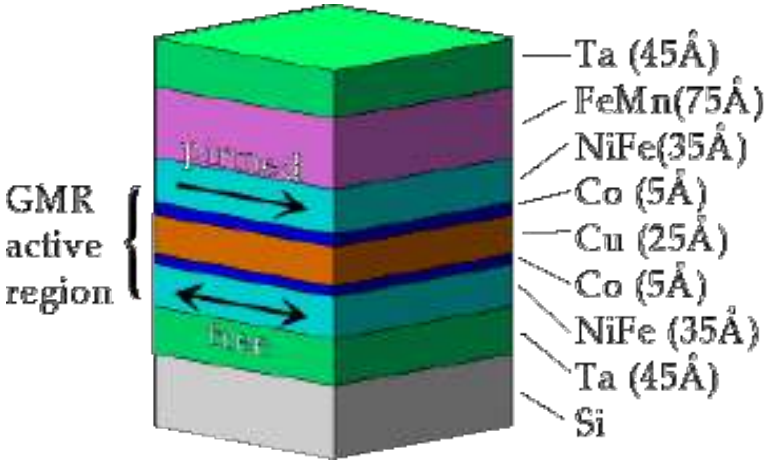


Рис. 1: Спин-вентильная структура на основе ультратонких магнитных пленок [5].

[3] Baibich M.N., Broto J.M., Fert A., Van Dau F.N., Petro F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A., Chazelas J. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices, Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2472-2475.

[4] Binash G., Grunberg P., Saurenbach F., Zinn W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange, Phys. Rev. 1989. V. B39. P. 4828-4830.

[5] Anthony T. C., Brug J. A., Shufeng Zhang, Magnetoresistance of symmetric spin valve structures. IEEE Transactions on Magnetics, 30(6), 3819–3821.

Область применения

Спиновые вентили, образованные на основе ультратонких магнитных пленок, находят широкое применение в микроэлектронике, вычислительной физике, клинической биомедицине[6]. Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации, точности и быстродействия запоминающих устройств и в ГМС-сенсорах для обнаружения и измерения биомолекул[7].

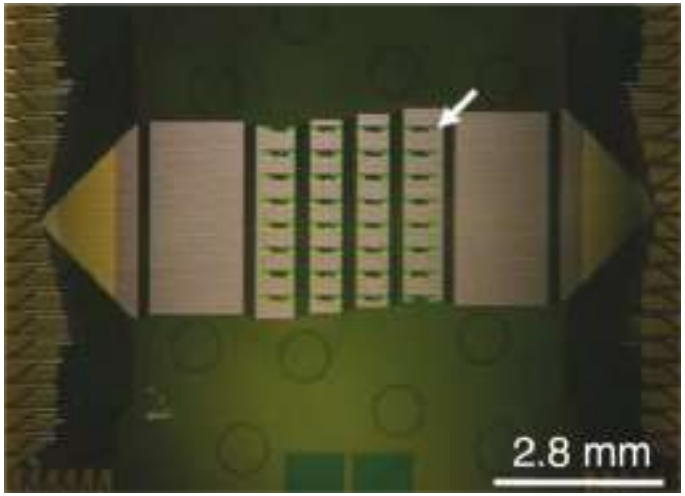


Рис. 2: Изображение чипа магнетонаносенсора, содержащего 64 датчика в матрице 8 x 8, применяемого для измерения связи функционализированного детектора с сенсором в жидкости в режиме реального времени. Стрелка указывает на один чип[8].

[6] Subhas Chandra Mukhopadhyay, Komkrit Chomsuwan, Chnithaka P. Gooneratne, and Sotoshi Yamada, A Novel Needle-Type SV-GMR Sensor for Biomedical Applications // IEEE Sensors journaL, 7(3), P.401, 2007.

[7] M.Djamal, Ramli, F. Haryanto and Khairurrijal, Biosensors for Health, Environment and Biosecurity, - C.6.- P.150. - 2011.

[8] Gaster, R. S., Hall, D. A., Nielsen, C. H., Osterfeld, S. J., Yu, H., Mach, K. E., Wang, S. X., Matrix-insensitive protein assays push the limits of biosensors in medicine. Nature Medicine, 15(11), 1327. - 2019.

Моделируемые структуры

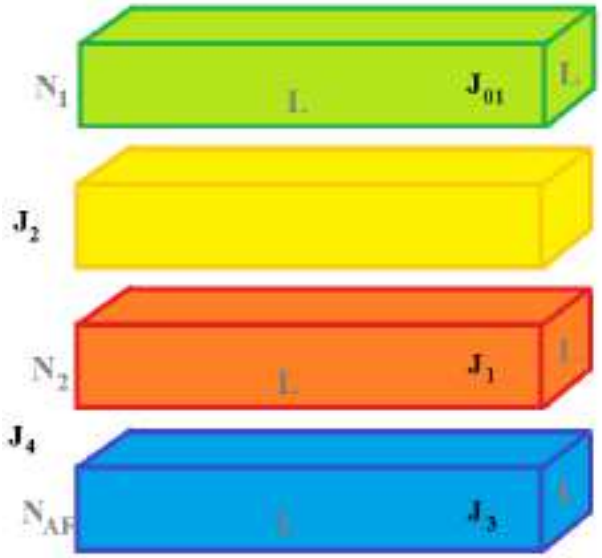


Рис. 3: Модель **обычного спинового вентиля**. L, N_1, N_2, N_{AF} - линейные размеры; $J_{01} > 0, J_1 > 0, J_2 > 0, J_3 < 0, J_4 < 0$ – константы обменного взаимодействия.

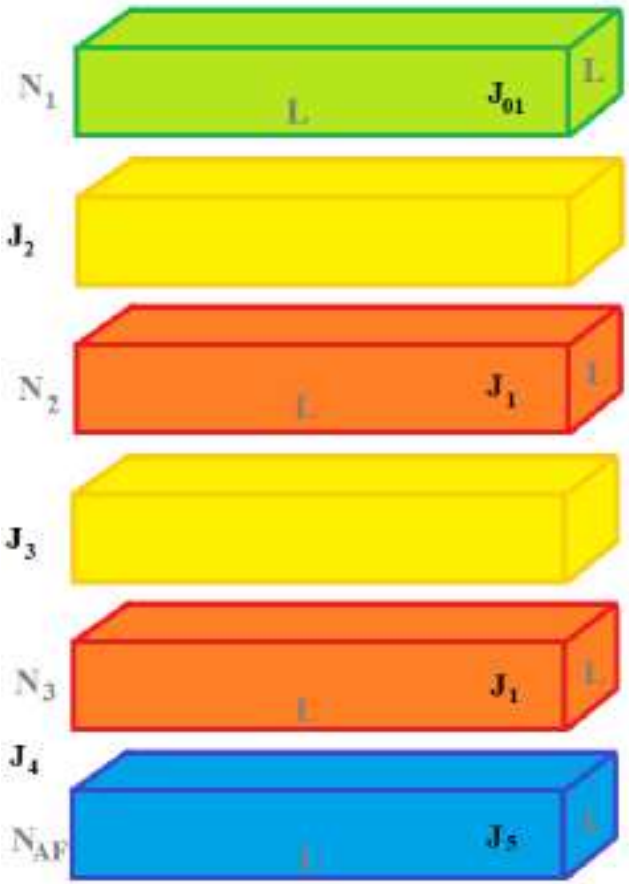


Рис. 4: Модель **усложненного спинового вентиля**. L, N_1, N_2, N_3, N_{AF} - линейные размеры; $J_{01} > 0, J_1 > 0, J_2 > 0, J_3 < 0, J_4 < 0, J_5 < 0$ – константы обменного взаимодействия.

Описание моделируемых систем

Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось», используемый для моделирования свойств ферромагнитной пленки в спин-вентильных структурах:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - h \sum_i S_i \qquad (1)$$

где $\langle i, j \rangle$ показывает, что суммирование идет по ближайшим соседям; J – константа, характеризующая обменное взаимодействие между спинами S_i, закрепленными в узлах гранецентрированной кубической решетки; $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ - трехмерный единичный вектор; $h = g\mu_0\mu_H H$ – переменная, характеризующая внешнее магнитное поле; Δ – параметр анизотропии, зависящий от толщины слоев N[9].

[9] Прудников П. В., Прудников В. В., Медведева М. А., Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках, Письма в ЖЭТФ. - 2014. - Т.100. - С. 501-505.

Параметр анизотропии $\Delta(N)$

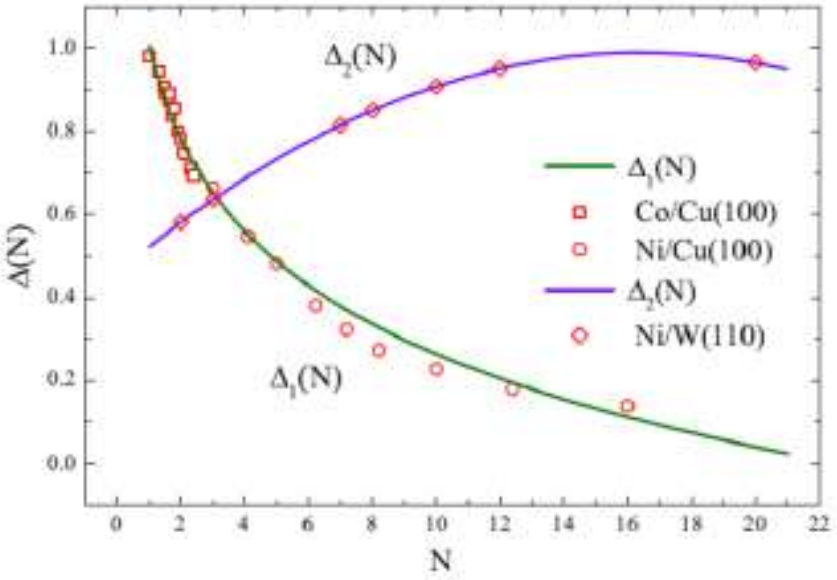


Рис. 5: Для систем, рассматриваемых в данной работе, соответствуют значения параметра анизотропии $\Delta_2(N)$. Кружки и квадраты соответствуют экспериментальным данным для $\mathrm{Ni/Cu(001)}$ и $\mathrm{Co/Cu(001)}$[10], соответственно. Ромбы соответствуют экспериментальным данным для $\mathrm{Ni(111)/W(110)}$[11]. Сплошные кривые получены аппроксимацией экспериментальных данных[12].

[10] F. Huang, et al. Phys. Rev. B, 49, 3962 (1994).

[11] Li and Baberschke, Phys. Rev. Lett., 68, 1208 (1992).

[12] Прудников П. В., Прудников В. В., Медведева М. А., Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках, Письма в ЖЭТФ. - 2014. - Т.100. - С. 501-505.

Используемые алгоритмы и параметры моделирования

- В данной работе реализуется **Монте-Карло исследование**.
- Для моделирования был применен **алгоритм Метрополиса**.
- Рассматривались системы $L \times L \times N$, где $L = 32$ – линейный размер системы, N – толщина одной пленки.
  1. Структура с толщинами $N_1 = 3ML$, $N_2 = 3ML$, $N_3 = 3ML$,
  2. Структура с толщинами $N_1 = 7ML$, $N_2 = 7ML$, $N_3 = 7ML$,
- Поведение релаксации намагниченности из высокотемпературного начального состояния и низкотемпературного начального состояния исследовалось при 1000 прогонках.
- Скейлинговые зависимости для намагниченности были исследованы при 1000 прогонках.
- Временной отрезок моделирования для каждой из исследуемых характеристик был равен 800 MCS/s.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

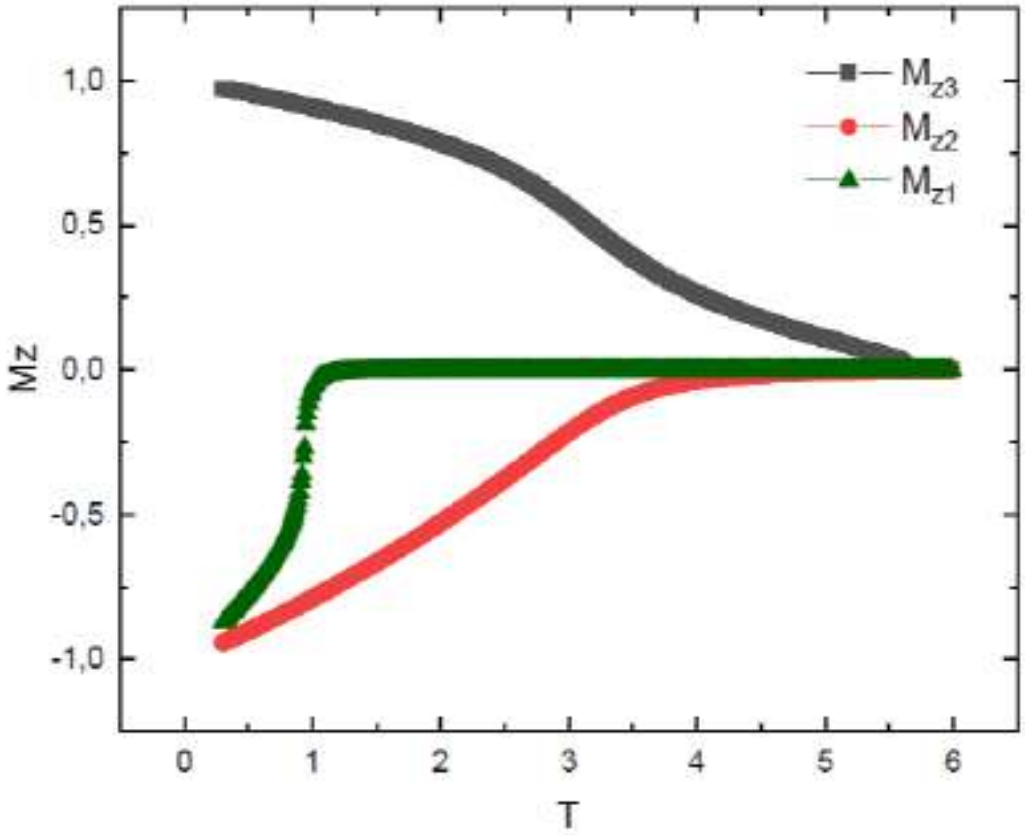


Рис. 6: Температурные зависимости намагниченности всех пленок с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ МС с анизотропией типа «легкая ось»[13].

[13] Дроворуб Е. В., Моделирование магнитных и гистерезисных явлений в усложненной спин-вентильной наноструктуре, 2021 год

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

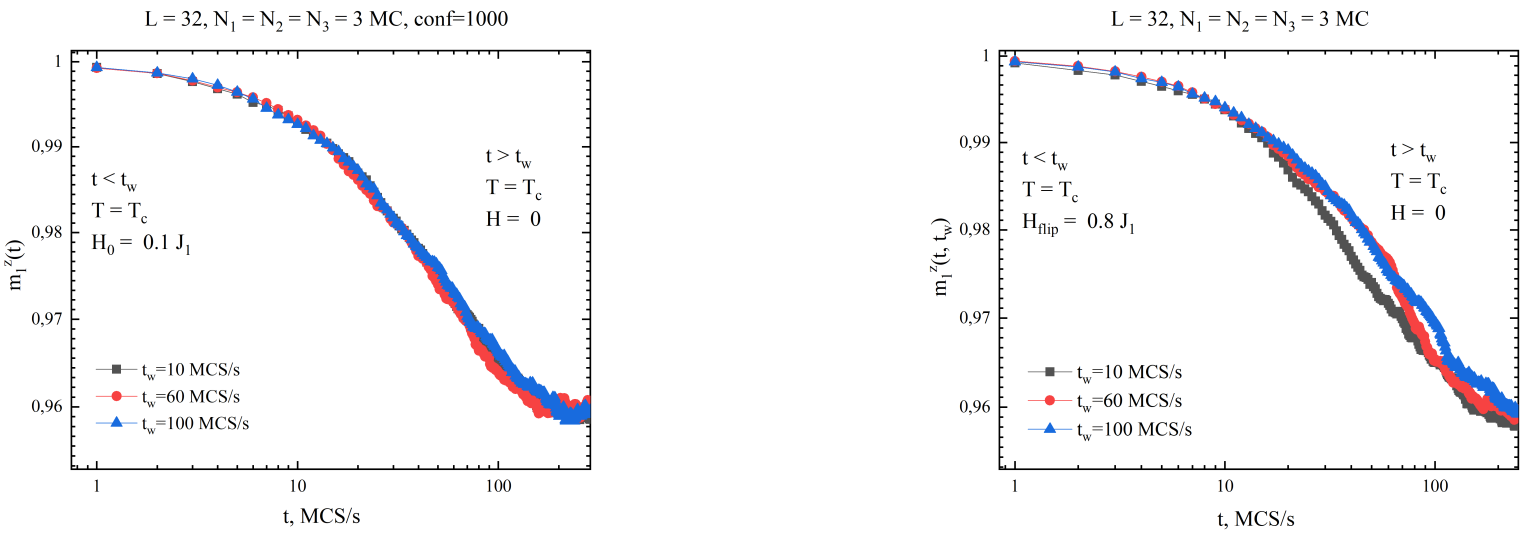


Рис. 7: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z(t)$ от времени t в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ МС при значении внешнего поля $h = 0.1J_1$(**слева**) и $h = 0.8J_1$(**справа**) при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

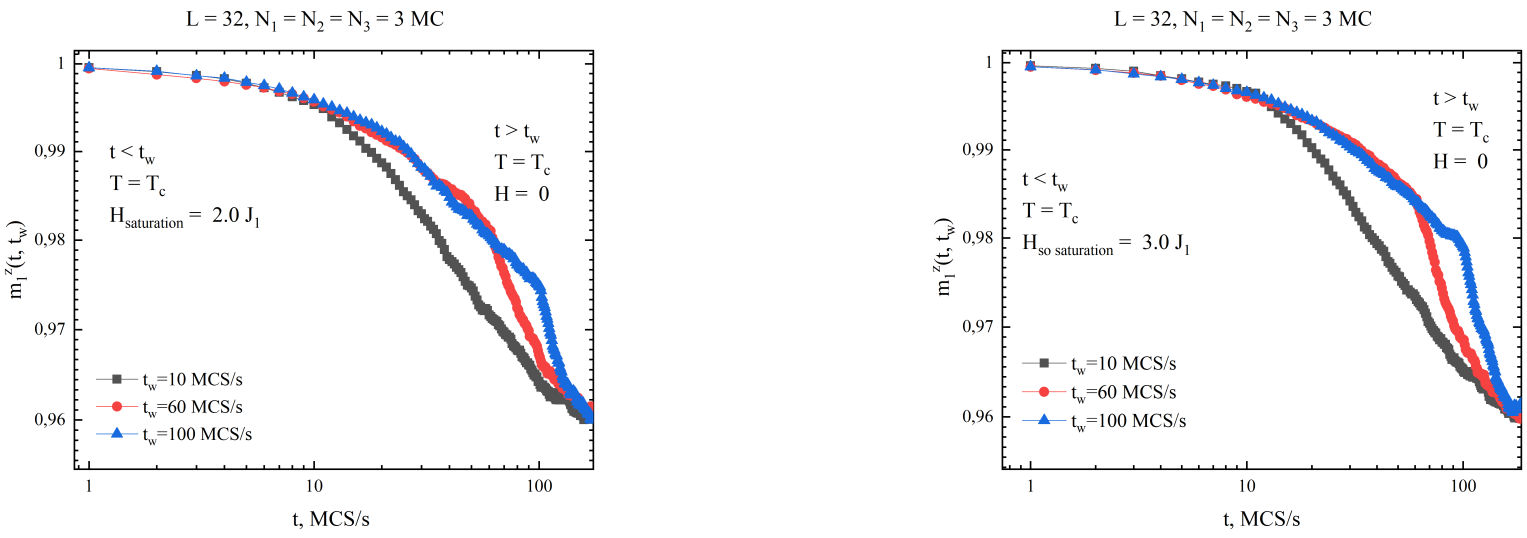


Рис. 8: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z(t)$ от времени t в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ МС при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$(**слева**) и $h = 3.0J_1$(**справа**) при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

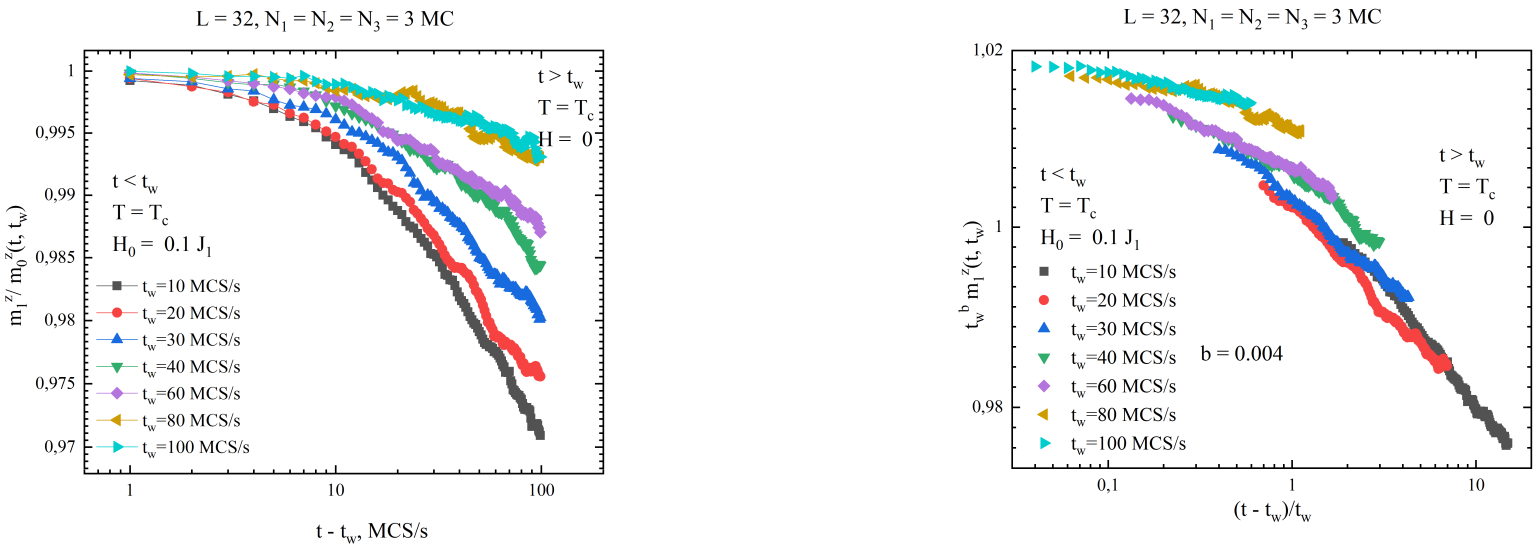


Рис. 9: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.004$ от времени $(t - t_w)/t_w$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 0.1J_1$ при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

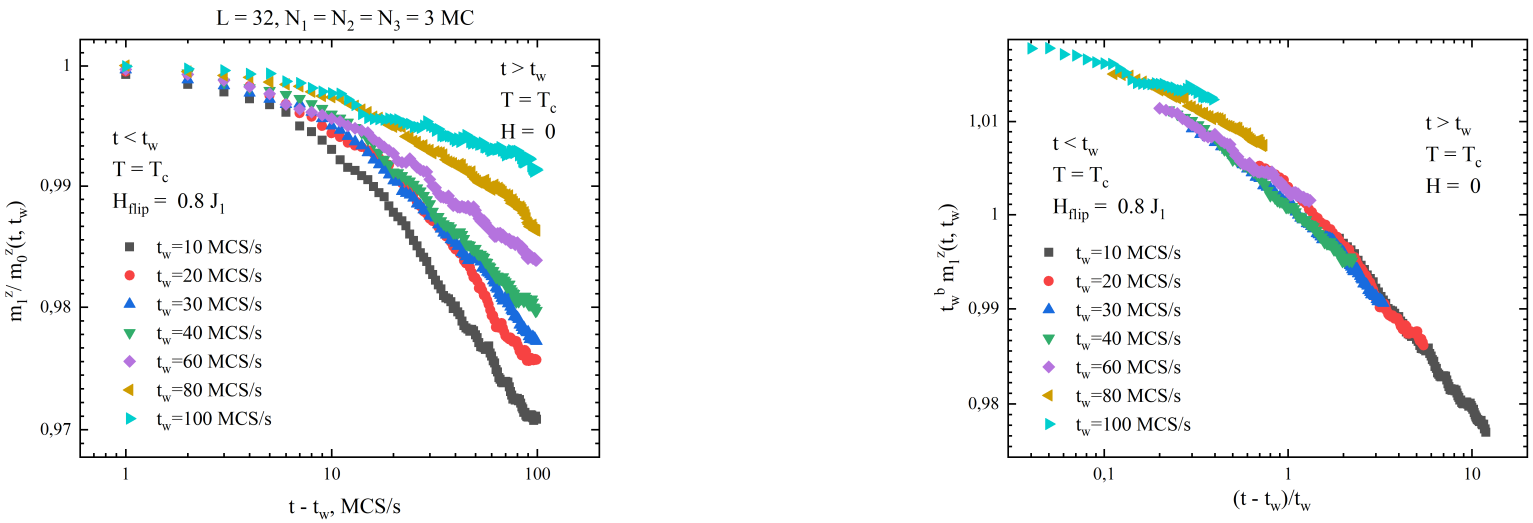


Рис. 10: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.004$ от времени $(t - t_w)/t_w$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 0.8J_1$ $T = 0.8J_1$ при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

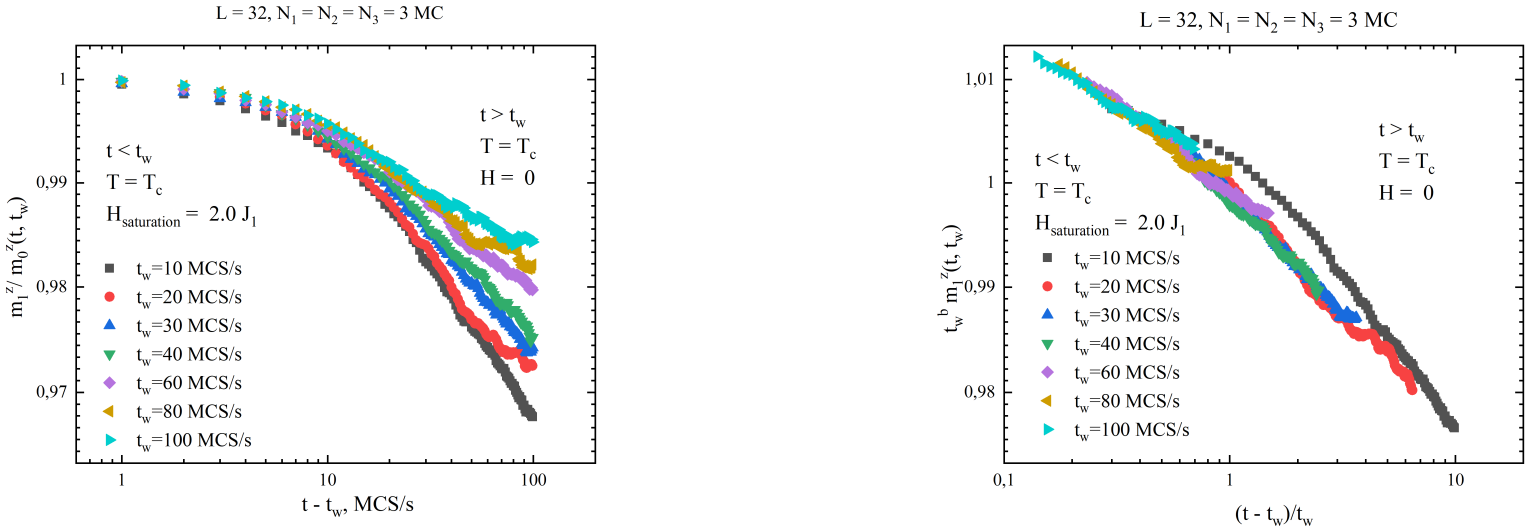


Рис. 11: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.0045$ от времени $(t - t_w)/t_w$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$ при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

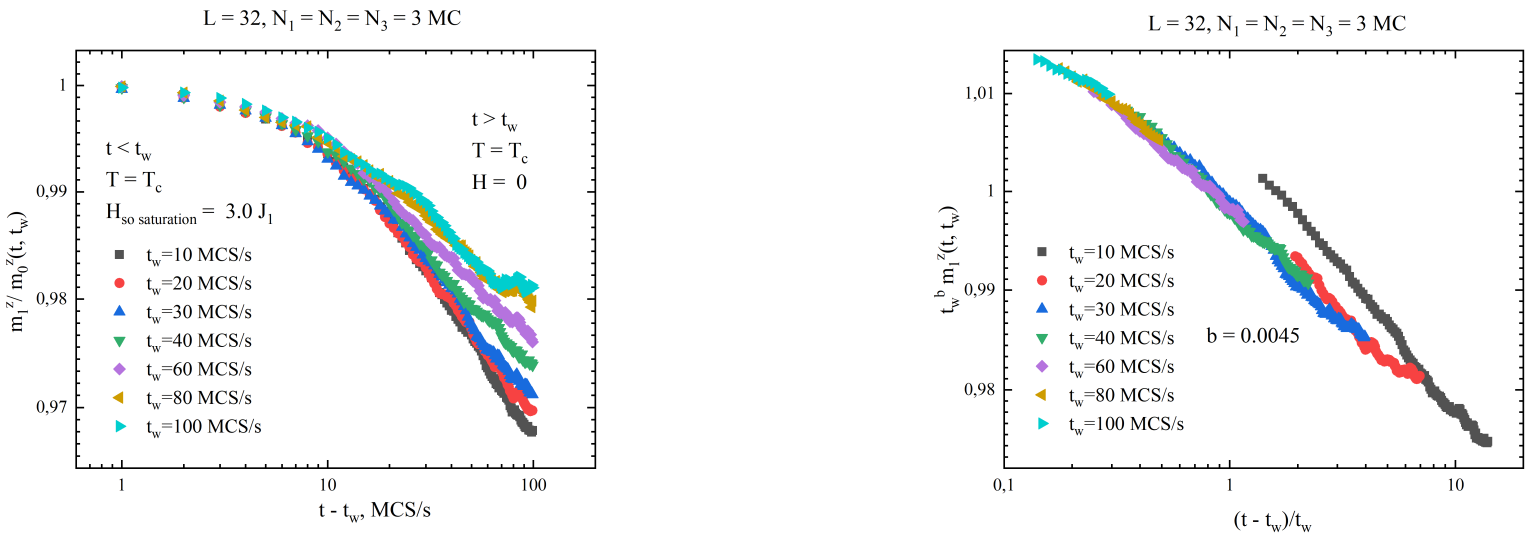


Рис. 12: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.004$ от времени $(t - t_w)/t_w$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 3.0J_1$ при температуре $T = 0.8J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

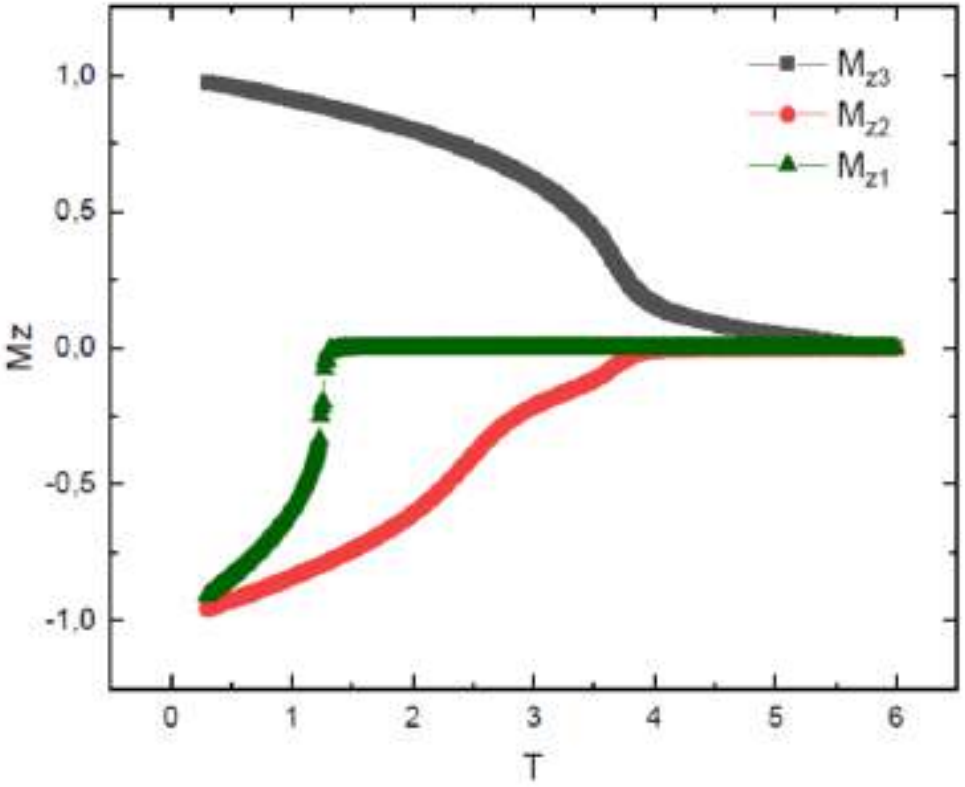


Рис. 13: Температурные зависимости намагниченности всех пленок с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ МС с анизотропией типа «легкая ось»[14].

[14] Дроворуб Е. В., Моделирование магнитных и гистерезисных явлений в усложненной спин-вентильной наноструктуре, 2021 год

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

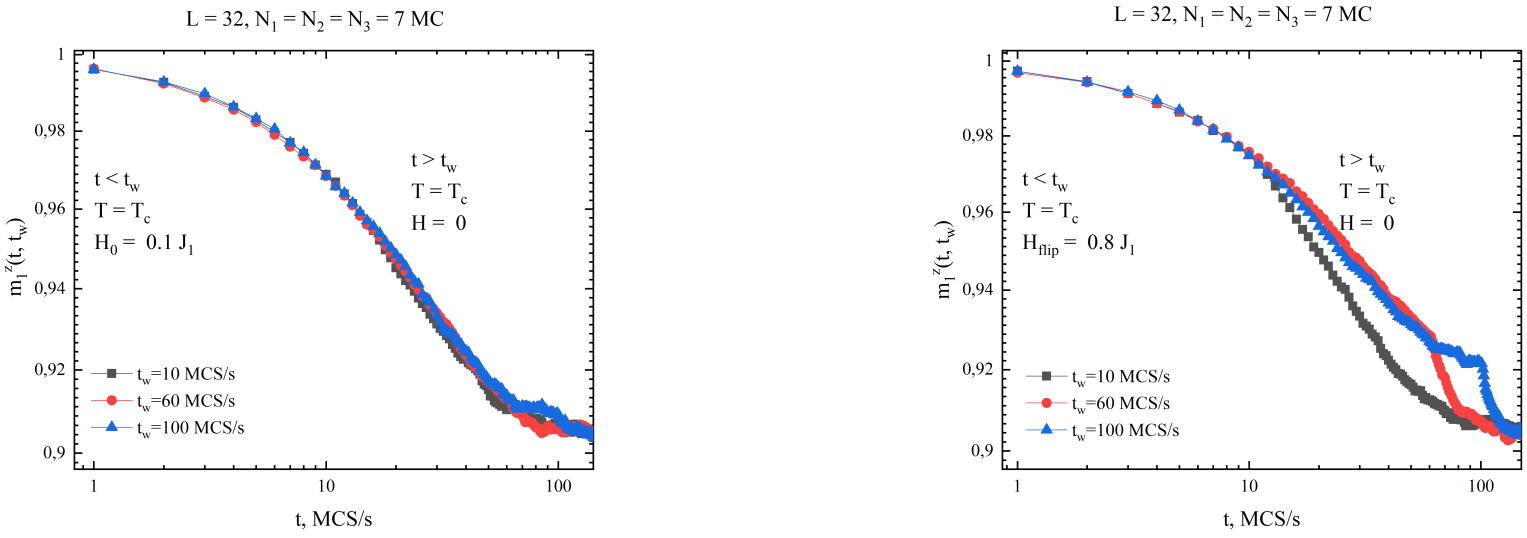


Рис. 14: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z(t)$ от времени t в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ MC при значении внешнего поля $h = 0.1J_1$(**слева**) и $h = 0.8J_1$(**справа**) при температуре $T = 1.2J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

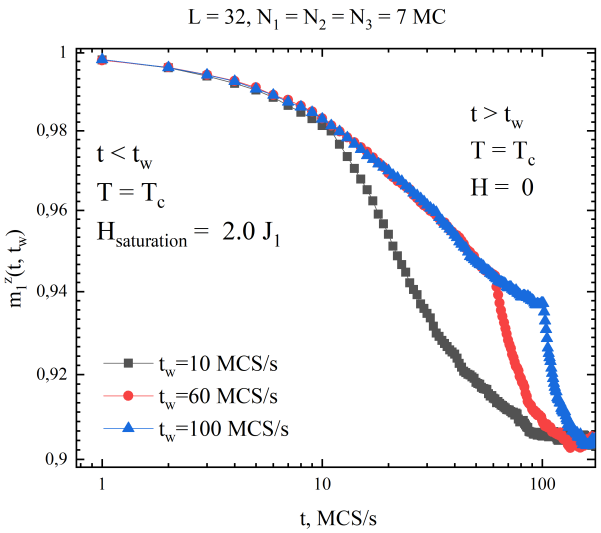
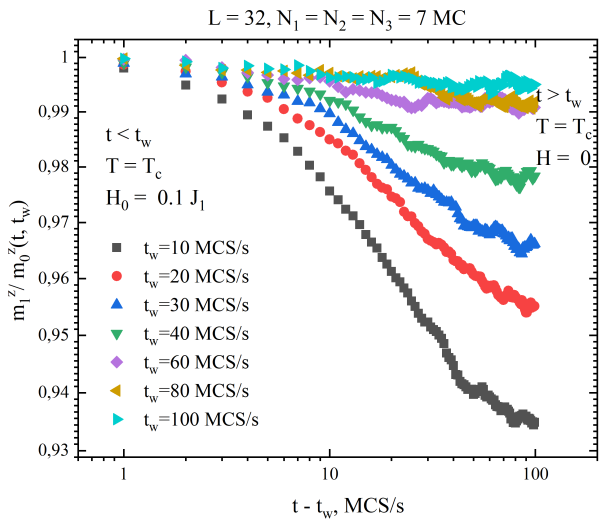


Рис. 15: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z(t)$ от времени t в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ МС при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$ при температуре $T = 1.2J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля



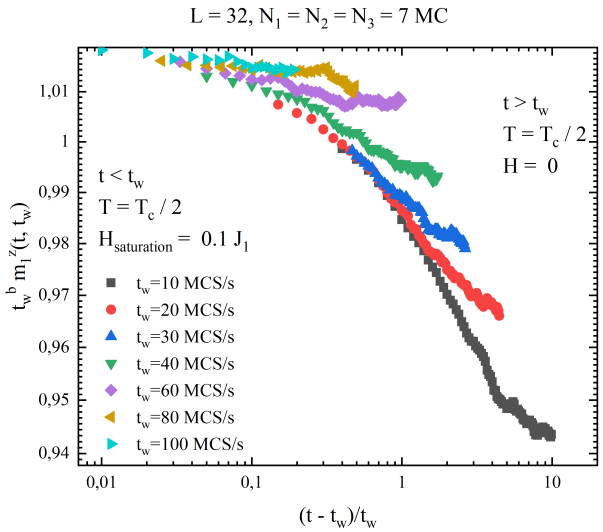
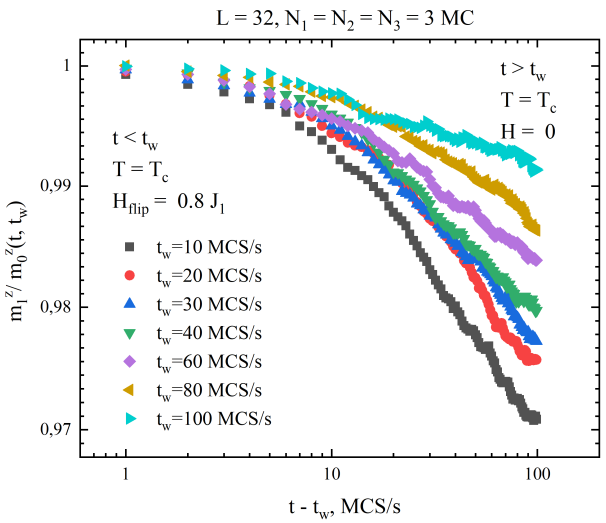


Рис. 16: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.0045$ от времени $(t - t_w)/t_w$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$ при температуре $T = 1.2J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля



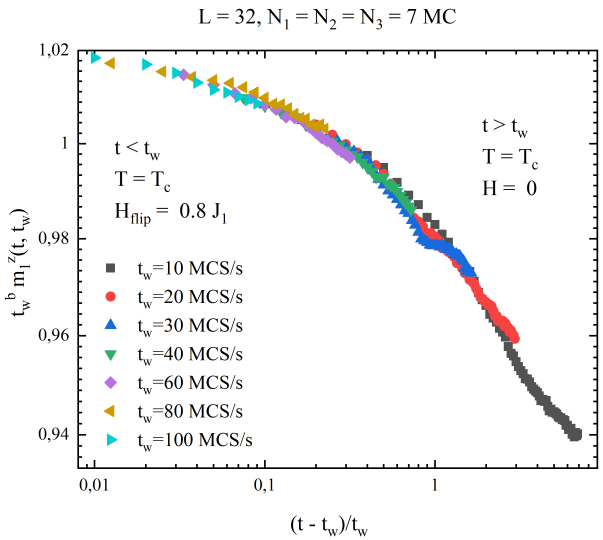


Рис. 17: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.0045$ от времени $(t - t_w)/t_w$ $(t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$ при температуре $T = 1.2J_1$.

Моделирование равновесного поведения усложненного спинового вентиля

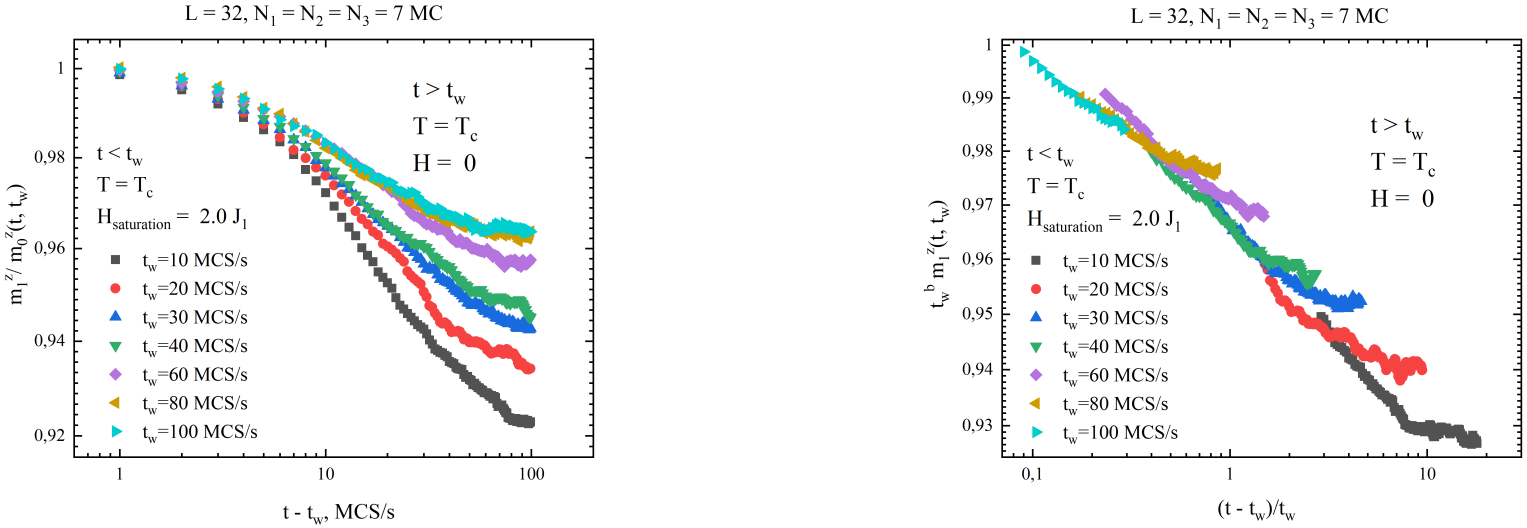


Рис. 18: Зависимость релаксации намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $(t - t_w)$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) при температуре $T = 0.8J_1$ (**слева**) и скейлинговая зависимость намагниченности $t_w^b m(t, t_w)$ при $b = 0.0045$ от времени $(t - t_w)/t_w$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s) в спин-вентильной структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ MC (**справа**) при значении внешнего поля $h = 2.0J_1$ при температуре $T = 1.2J_1$.

Заключение

В данной исследовательской работе было осуществлено исследование поведения усложненной спин-вентильной наноструктуры, которая описывается анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» методами Монте-Карло. На основании полученных результатов можно сделать выводы:

- Было осуществлено исследование неравновесного поведения усложненной спин-вентильной структуры. Была показана зависимость приведенной намагниченности $m_1^z/m_0^z(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ ($t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$ MCS/s), которая характеризует поведение релаксации намагниченности.
- В структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 3$ MC исследование проявления эффектов старения становится нагляднее с ростом величины внешнего магнитного поля h. При значениях $h = 2.0, 3.0J_1$ система с увеличением времени ожидания t_w релаксирует за более длительный промежуток времени. Это подтверждает то, что в данной зависимости в усложненной спин-вентильной структуре наблюдаются эффекты старения. Наличие эффектов старения подтверждается коллапсом данных для динамических скейлинговых зависимостей.
- Изначально предполагалось, что в структуре с толщинами $N_1 = N_2 = N_3 = 7$ MC будет наблюдаться подобная картина. Но исходя из полученных результатов, наилучшее проявление эффектов старения было продемонстрировано при величине внешнего поля $h = 0.8J_1$. Возможно даннлй результат связан с неудачным выбором степенного параметра b. Для дальнейших выводов необходимо получить дополнительные результаты.

- Результаты исследований для неравновесного поведения усложненных спин-вентильных структур были представлены на XLV региональной научно-практической конференции «Молодежь третьего тысячелетия» (г. Омск, 2021-ый год) и будут опубликованы в сборнике научных статей [15], а также в устных докладах [16], [17].

Спасибо за внимание!

[15] Дроворуб Е. В., Егорина А. С., Прудников В. В., Исследование равновесного и неравновесного поведения усложненного спинового вентиля, описываемого анизотропной моделью Гейзенберга // XLV региональная научно - практическая конференция «Молодежь третьего тысячелетия»: сборник научных статей. Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2021.

[16] Егорина А. С., Прудников П. В,, Моделирование методом Монте-Карло критических свойств усложненного спинового вентиля, IX Международная научная конференция "Математическое и компьютерное моделирование посвященная 85-летию профессора В.И. Потапова, г. Омск, ноябрь, 2021-ый год(дистанционный доклад).

[17] Егорина А. С., Прудников П. В,, Моделирование методом Монте-Карло критических свойств усложненного спинового вентиля, 64-ая Всероссийской научной конференции МФТИ, г. Москва, декабрь, 2021-ый год(дистанционный доклад)