



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 63 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

**Иванов А.В., Зипунова Е.В.,
Книжник А.А., Попков А.Ф.**

Модель анизотропии на
скомпенсированном
интерфейсе кубический
ферромагнетик-
антиферромагнетик со
структурой Cu_3Au ($L1_2$)

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Модель анизотропии на
скомпенсированном интерфейсе кубический ферромагнетик-антиферромагнетик со структурой
 Cu_3Au ($L1_2$) / А.В.Иванов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 63. 31 с.
doi:[10.20948/prepr-2018-63](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-63)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-63>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

А.В. Иванов, Е.В. Зипунова, А.А. Книжник, А.Ф. Попков

**Модель анизотропии
на скомпенсированном интерфейсе
кубический ферромагнетик–
антиферромагнетик со структурой
 Cu_3Au ($L1_2$)**

Москва — 2018

Иванов А.В.¹, Зипунова Е.В.², Книжник А.А.³, Попков А.Ф.³

e-mail: aivanov@keldysh.ru, e.zipunova@gmail.com

¹ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, ²МФТИ (ГУ), ³ООО "Кинтех Лаб"

Модель анизотропии на скомпенсированном интерфейсе кубический ферромагнетик–антиферромагнетик со структурой Cu_3Au ($L1_2$)

Магниторезистивная память (MRAM) потенциально способна заменить большую часть различных типов современной полупроводниковой памяти.

Ключевым элементом ячейки MRAM является антиферромагнитный слой с гранецентрированной кубической решеткой, фиксирующий намагниченность примыкающего к нему ферромагнитного слоя. В данной работе изучен механизм возникновения обменной анизотропии на скомпенсированном интерфейсе антиферромагнетика и ферромагнетика, построена многослойная микромагнитная модель антиферромагнетика. Показано, что направление оси анизотропии определяется одним из восьми состояний антиферромагнетика, при этом традиционная однослойная макроспиновая модель антиферромагнетика дает некорректные результаты. Предложена эффективная двухслойная модель антиферромагнетика с «тяжелым» внутренним слоем.

Ключевые слова: магниторезистивная память, численное моделирование магнетиков

Anton Valeryevich Ivanov¹, Elizaveta Vyacheslavovna Zipunova²,

Andrey Aleksanrovich Knizhnik³, Anatoliy Fedorovich Popkov³

e-mail: aivanov@keldysh.ru, e.zipunova@gmail.com

¹KIAM RAS, ²MIPT, ³Kintech Lab Ltd.

The anisotropy model on a compensated interface of cubic ferromagnet–antiferromagnet with structure Cu_3Au ($L1_2$)

Magnetoresistive memory (MRAM) is potentially capable to replace most of the various types of modern semiconductor memory.

The key element of the MRAM cell is an antiferromagnetic layer with a face-centered cubic lattice that fixes the magnetization of the adjacent ferromagnetic layer. In this paper we study the mechanism of the appearance of the exchange anisotropy on the compensated interface of an antiferromagnet and a ferromagnet, there is constructed a multilayered micro-magnetic model of an antiferromagnet. It is shown that the direction of the anisotropy axis is determined by one of the eight states of the antiferromagnet. The traditional single-layer macro-spin model of an antiferromagnet gives incorrect results. There is proposed an effective two-layer model of an antiferromagnet with a "heavy" inner layer.

Keywords: MRAM, numerical simulation of magnets

Содержание

1	Введение	3
2	Геометрия образца и кристаллическая решетка	6
3	Энергия системы	7
4	Стационарные состояния антиферромагнетика	8
5	Методы минимизации энергии	10
6	Результаты для образца толщиной 51 слой	12
7	Зависимость основных свойств системы от числа слоев	15
8	Однослойная (макроспиновая) модель	16
9	Эффективная двухслойная модель с «тяжелым» внутренним слоем	21
10	Заключение	29
	Список литературы	29

Введение

Магниторезистивная память MRAM (magnetoresistive random-access memory) и ее разновидности STT-RAM, TAS-RAM) имеет быстроедействие, сравнимое с памятью типа SRAM (static random access memory), плотность ячеек, сравнимую с памятью типа DRAM (dynamic random access memory), при этом MRAM является энергонезависимой памятью и не страдает деградацией по прошествии времени в сравнении с флэш памятью. Такая комбинация свойств может сделать MRAM «универсальной памятью», способной заменить SRAM, DRAM, EEPROM (Electrically Erasable Programmable Read-Only Memory) и флэш память. Важнейшим свойством MRAM является устойчивость к внешним воздействиям (электрическим и магнитным полям, частицам высоких энергий), что делает этот вид памяти особенно интересным для применения в устройствах с повышенными требованиями к надежности работы в экстремальных условиях. Кроме того, на основе технологий MRAM возможно создание сенсоров магнитных полей и различных устройств для обработки информации.

Одним из ключевых элементов MRAM является так называемый опорный ферромагнитный слой с закрепленной намагниченностью, рис. 1. Закрепление намагниченности осуществляется либо комбинацией синтетического антиферромагнетика и антиферромагнитного слоя, либо непосредственно соседством ферромагнетика с антиферромагнетиком. В обоих случаях микромагнитное состояние ячейки в целом зависит от степени закрепления ферромагнитного слоя антиферромагнитным слоем, обусловленного их обменным взаимодействием на интерфейсе. Изменение состояния ячейки связано с перемагничиванием тонкого слоя ферромагнетика с незакрепленной намагниченностью, называемого свободным слоем, отделенного от опорного ферромагнитного слоя туннельной прослойкой на 180° , при этом антиферромагнитный слой, обеспечивающий фиксацию намагниченности в опорном слое, отвечает также за стабильность хранения информации. В устройствах магнитной логики в качестве носителя

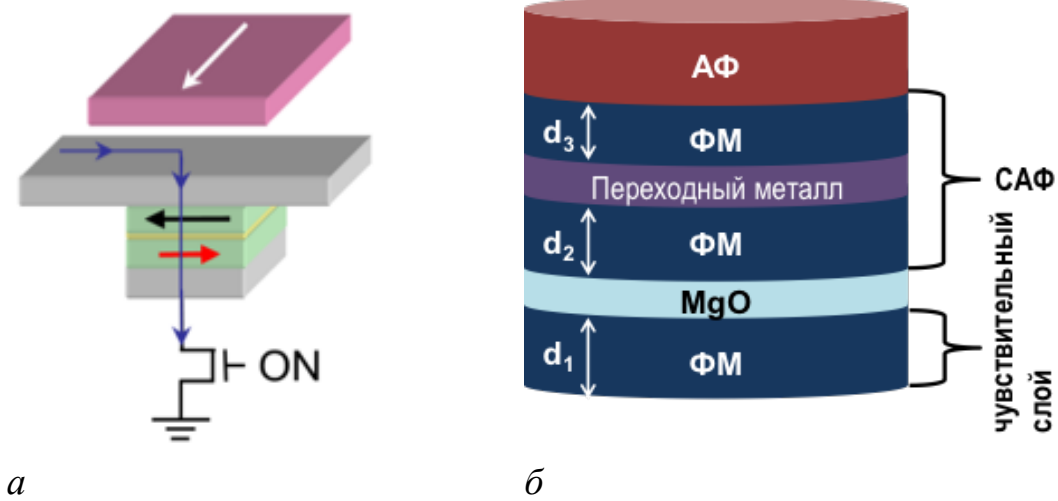


Рис. 1. Принципиальная электрическая схема (а) и структура (б) ячейки памяти TAS-MRAM. Свободный (чувствительный) ферромагнитный слой толщины d_1 отделен туннелирующим диэлектрическим слоем из MgO от синтетического антиферромагнетика (САФ), состоящего из двух ферромагнитных слоев толщами $d_{2,3}$, разделенных тонким слоем рутения. Верхний антиферромагнитный слой отвечает за закрепление намагниченности ближайшего ферромагнитного слоя в САФ. Толщины $d_{1,2,3} \approx 2 \div 10$ нм, намагниченности ферромагнитных слоев ориентированы в горизонтальной плоскости.

информации, наоборот, используется опорный слой ферромагнетика, обменно связанного с антиферромагнетиком. Перед инженерами, создающими устройства памяти и логики с антиферромагнитным закреплением спинов в магнитных слоях, встает сложная задача по выбору материалов и геометрии слоев — сильная обменная связь между ферромагнетиком и антиферромагнетиком обеспечивает высокую стабильность хранения информации, но затрудняет перезапись данных (изменение состояния ячейки).

Данная работа посвящена изучению механизма возникновения анизотропии между слоями ферромагнетика и антиферромагнетика и построению эффективной модели, предназначенной для моделирования устройств MRAM. Наиболее широко в последнее время в гетероструктуре ферромагнетик/антиферромагнетик в современных элементах памяти используется сочетание сплавов CoFe и IrMn. Мы рассмотрим в качестве материалов пару IrMn (антиферромагнетик) и Fe (ферромагнетик), микромагнитные свойства которой экспериментально и теоретически изучались, например в работах [1, 2]. Однако детально механизм возникновения обменной анизотропии на интерфейсе подобной структуры до конца раскрыт не был.

Антиферромагнетик IrMn имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, и интерфейс между IrMn и Fe является полностью скомпенсированным, то есть все три магнитных подрешетки антиферромагнетика взаимодействуют с

ферромагнетиком в равной степени. Механизм возникновения анизотропии в системах ферромагнетик–антиферромагнетик с объемо–центрированной кубической (ОЦК) решеткой и скомпенсированным интерфейсом хорошо изучен [3, 4].

Механизмы образования обменного взаимодействия слоев на интерфейсе разнообразны и различаются для скомпенсированного и декомпенсированного упорядоченного интерфейса от шероховатого интерфейса и решетки с дефектами упаковки [5–11]. Цитированные работы касаются рассмотрения двухподрешеточных антиферромагнетиков с антипараллельной ориентацией спинов. Обменная анизотропия на интерфейсе антиферромагнетика со сложной спиновой структурой, таких, как IrMn, изучалась теоретически и экспериментально всего в нескольких работах [12–14] и оказалась достаточно сложной.

Спиновая структура двхкомпонентного антиферромагнетика IrMn существенно зависит от распределения атомов в ячейках кристаллической решетки. В зависимости от технологии нанесения слоя антиферромагнетика спиновая структура может меняться от хаотической типа спинового стекла до строго упорядоченной. В этой связи характер обменного закрепления спинов ферромагнетика на интерфейсе слоев существенно зависит от типа атомного упорядочения и спиновой структуры антиферромагнетика на интерфейсе (см. напр. [15]). Мы будем рассматривать антиферромагнетик с кристаллической структурой $L1_2$, которая показана на рис. 2. Для такой структуры, используя асимптотические приближения, удастся построить достаточно прозрачную аналитическую модель поверхностной обменной анизотропии и довести численные расчеты до конца, используя литературные данные работ [1, 2].

При этом изучаемый эффект оказывается крайне слабо выражен на фоне сильного обменного взаимодействия внутри антиферромагнетика (порядка $10^{-3\div 6}$), что существенно затрудняет проведение расчетов.

Наиболее адекватным методом моделирования магнитных материалов является моделирование «атом–в–атом» на основе системы уравнений Ландау–Лифшица. К сожалению, для решения инженерных задач такой подход является слишком сложным с вычислительной точки зрения — для расчета одного переключения устройства актуального размера необходимо решать систему из более чем 10^6 уравнений на интервале из более чем 10^6 шагов по времени, не говоря о необходимости учета полей демагнитизации. Оптимальным с точки зрения соотношения корректность модели/вычислительная сложность является микромагнитный подход, при котором образец разбивается на области с однородной намагниченностью.

В работе показано, что направление оси анизотропии обусловлено одним из восьми возможных состояний антиферромагнетика, при этом для адекватного описания поведения связанной системы ферромагнетик–антиферромагнетик традиционное микромагнитное разбиение образца только по площади слоя не работает — необходимо учитывать многослойную структуру антиферромагне-

тика, что близко к модели Маури [16]. Построена эффективная двухслойная модель антиферромагнетика с «тяжелым» внутренним слоем.

Геометрия образца и кристаллическая решетка

Для изучения эффективной анизотропии для Fe в системе IrMn/Fe, моделируется антиферромагнитный цилиндр IrMn со свободными границами, взаимодействующий через интерфейс с ферромагнетиком Fe. Пусть цилиндр располагается вертикально, тогда интерфейс между IrMn и Fe будет располагаться горизонтально на нижней грани.

В данной работе рассматривается IrMn₃ с ГЦК решеткой, в которой немагнитные атомы Ir расположены в узлах решетки. Такую структуру будем называть неполной ГЦК решеткой. ГЦК решётка повернута по направлению 111 (рис. 2). На рис. 3 изображен интерфейс, где каждая точка — атом Mn.

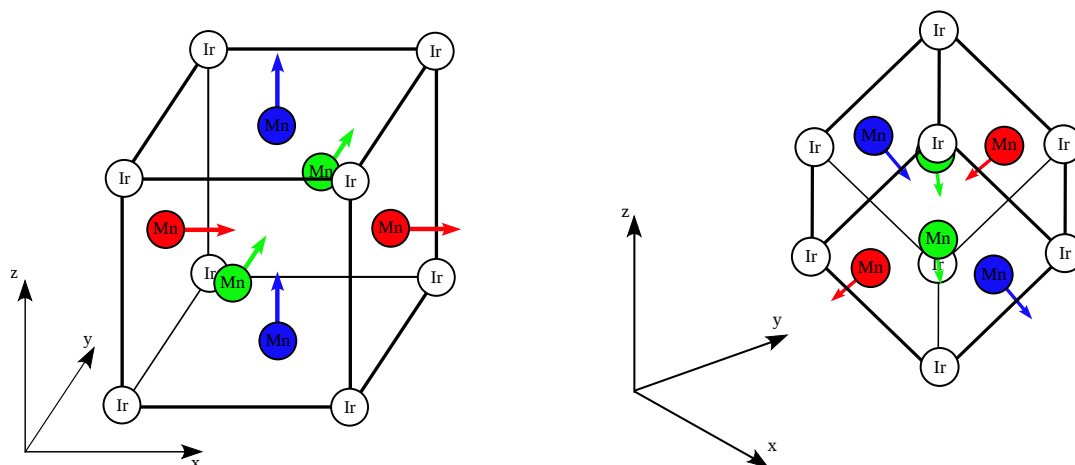


Рис. 2. ГЦК решетка, повернутая по 100 и 111.

При такой структуре кристаллической решетки можно выделить три под-решетки:

1. атомы, лежащие на грани, перпендикулярной оси OX;
2. атомы, лежащие на грани, перпендикулярной оси OY;
3. атомы, лежащие на грани, перпендикулярной оси OZ.

Учитывая симметрию расположения атомов, можно заключить, что оси анизотропии направлены перпендикулярно граням, на которых лежат атомы. Так как решётка повёрнута по направлению 111 (рис. 2), то оси анизотропии можно задать следующим образом:

$$\mathbf{n}_{K1} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_{K2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_{K3} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix}.$$

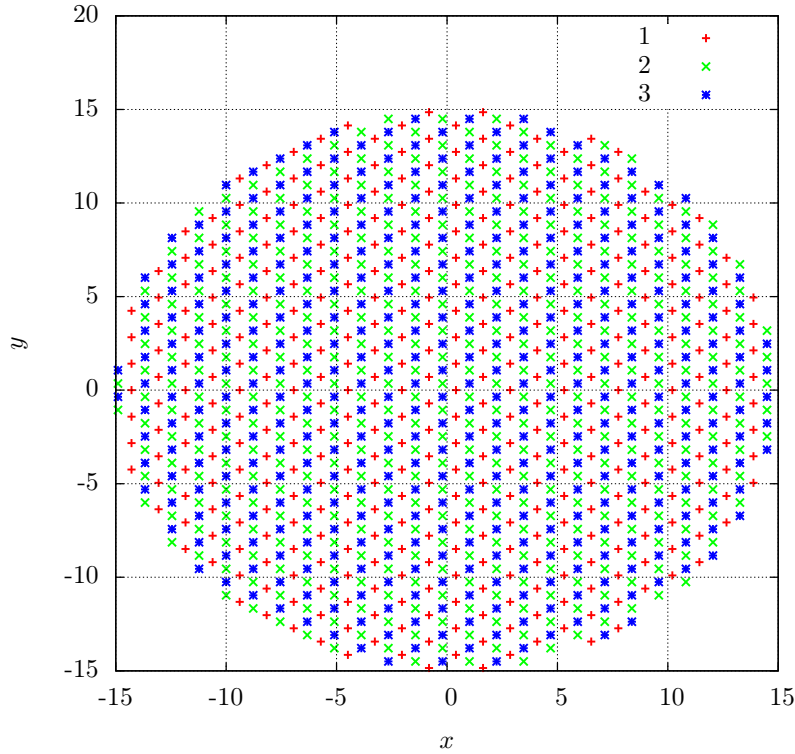


Рис. 3. Атомы Mn на интерфейсе: 1,2,3 — атомы трёх подрешеток.

Энергия системы

Поскольку обмен в ферромагнетике достаточно большой, будем считать что ферромагнетик находится в моноклинном состоянии. Направление намагниченности Fe будем обозначать единичным вектором \mathbf{m}_F . Кроме того, пусть намагниченность Fe лежит в горизонтальной плоскости и задаётся углом φ :

$$\mathbf{m}_F = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)^T.$$

Тогда энергия системы

$$\begin{aligned} W &= W_{\text{exch}} + W_{\text{ani}}, \\ W_{\text{exch}} &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{AFij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - \sum_{i, i \in \text{IF}} J_{FAF} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_F), \\ W_{\text{ani}} &= - \sum_i K (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{n}_K^i)^2, \end{aligned}$$

где W_{exch} — энергия обменного взаимодействия, W_{ani} — энергия анизотропии, \mathbf{m}_i — единичный вектор, задающий направление намагниченности i -го атома, J_{AFij} — интеграл обменного взаимодействия между соседними атомами антиферромагнетика (неравен нулю только для ближайших соседей), J_{FAF} — интеграл обменного взаимодействия между соседними атомами антиферромагнетика и

ферромагнетика, лежащими на интерфейсе (вклад считается только для атомов антиферромагнетика, принадлежащих к интерфейсу $i \in \text{IF}$), K — коэффициент анизотропии, \mathbf{n}_K^i — ось анизотропии для i -го атома (одна из трех возможных).

Стационарные состояния антиферромагнетика

Рассмотрим сначала пространственно-однородные стационарные состояния антиферромагнетика IrMn_3 в отсутствие поверхностного взаимодействия с ферромагнетиком. Такие состояния можно разделить на восемь типов, каждый тип соответствует конфигурации магнитных моментов подрешеток, при которой магнитные моменты сонаправлены или противоположно направлены соответствующему вектору, задающему ось анизотропии $\sigma_j \mathbf{n}_{Kj}$, $\sigma_j = \pm 1$ (рис. 4). В отсутствие ферромагнетика, при $J_{\text{AF}} \gg K$ намагниченности всех трёх подрешёток лежат практически в одной плоскости под углом 120° друг к другу, перпендикуляр к этой плоскости сонаправлен вектору $\sigma_1 \mathbf{n}_{K1} + \sigma_2 \mathbf{n}_{K2} + \sigma_3 \mathbf{n}_{K3}$, а угол между \mathbf{n}_K и плоскостью составляет $\theta_0 = \arcsin \sqrt{1/3} \approx 35^\circ$. По мере роста анизотропии намагниченности подрешеток выходят из плоскости. Рассматриваемые образцы достаточно малы и находятся в монодоменном состоянии, поэтому номер состояния S можно однозначно определить на основе знака проекции средней намагниченности подрешетки на соответствующий вектор \mathbf{n}_K (таблица 1):

$$S = \sum_{i=1}^3 \frac{1 - \text{sign}(\mathbf{n}_{Ki} \cdot \langle \mathbf{m}_i \rangle)}{2} 2^{i-1}.$$

Для состояний $S = 0$ и $S = 7$ плоскости, содержащие треугольник $\langle \mathbf{m}_{1,2,3} \rangle$, горизонтальны (совпадают с плоскостью интерфейса ферромагнетик–антиферромагнетик), для состояний $S = 1 \dots 6$ плоскости лежат под углом $\approx 90^\circ \pm 19.5^\circ$ к плоскости интерфейса.

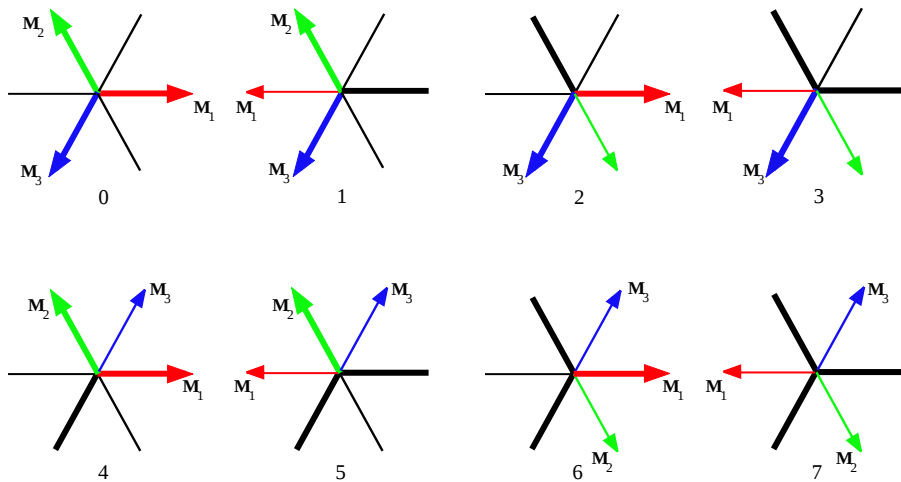


Рис. 4. Восемь стационарных состояний в проекции на плоскость интерфейса.

номер состояния S	0	1	2	3	4	5	6	7
первая подрешетка $\langle \mathbf{m}_1 \rangle$	\mathbf{n}_{K1}	$-\mathbf{n}_{K1}$	\mathbf{n}_{K1}	$-\mathbf{n}_{K1}$	\mathbf{n}_{K1}	$-\mathbf{n}_{K1}$	\mathbf{n}_{K1}	$-\mathbf{n}_{K1}$
вторая подрешетка $\langle \mathbf{m}_2 \rangle$	\mathbf{n}_{K2}	\mathbf{n}_{K2}	$-\mathbf{n}_{K2}$	$-\mathbf{n}_{K2}$	\mathbf{n}_{K2}	\mathbf{n}_{K2}	$-\mathbf{n}_{K2}$	$-\mathbf{n}_{K2}$
третья подрешетка $\langle \mathbf{m}_3 \rangle$	\mathbf{n}_{K3}	\mathbf{n}_{K3}	\mathbf{n}_{K3}	\mathbf{n}_{K3}	$-\mathbf{n}_{K3}$	$-\mathbf{n}_{K3}$	$-\mathbf{n}_{K3}$	$-\mathbf{n}_{K3}$
направление $\sum \langle \mathbf{m} \rangle_i, \theta$	0°	70°	70°	109°	70°	109°	109°	180°
направление $\sum \langle \mathbf{m} \rangle_i, \varphi$	—	180°	300°	240°	60°	120°	0°	—

Таблица 1. Стационарные состояния антиферромагнетика

Между двумя стационарными состояниями, соответствующими соседним конфигурациям (отличающимся ориентацией одной из подрешеток), есть энергетический барьер Δ_{WS} , который может быть оценен аналитически при $K \ll |J_{AF}|$. Пусть намагниченности подрешеток выходят из плоскости на угол $\delta \ll 1$, тогда энергия одной обменной связи

$$\begin{aligned} w_{\text{exch}} &= -J_{AF} \left(\cos \frac{\pi}{3} \cos \delta, \sin \frac{\pi}{3} \cos \delta, \sin \delta \right) \cdot \left(\cos \frac{\pi}{3} \cos \delta, -\sin \frac{\pi}{3} \cos \delta, \sin \delta \right) = \\ &= -J_{AF} \left[\sin^2 \delta - \frac{1}{2} \cos^2 \delta \right] = -\frac{1}{2} J_{AF} [3 \sin^2 \delta - 1] = -\frac{1}{4} J_{AF} [1 - 3 \cos 2\delta], \end{aligned}$$

полная энергия в расчете на один атом

$$W_{\min} = -K \cos^2 (\theta_0 - \delta) + 4w_{\text{exch}} = -K \cos^2 (\theta_0 - \delta) - J_{AF} [1 - 3 \cos 2\delta].$$

Поскольку в состоянии равновесия должно выполняться условие

$$\frac{\partial W_{\min}}{\partial \delta} = 0,$$

получаем уравнение на угол δ

$$-K \sin 2(\theta_0 - \delta) - 6J_{AF} \sin 2\delta = 0,$$

с учетом того что $\delta \ll 1$

$$2K\delta \cos 2\theta_0 - K \sin 2\theta_0 - 12J_{AF}\delta = 0, \quad \delta = -\frac{K \sin 2\theta_0}{12J_{AF} - 2K \cos 2\theta_0} \approx -\frac{K \sin 2\theta_0}{12J_{AF}}.$$

При смене состояния S намагниченность одной из подрешеток меняет знак проекции на соответствующую ось анизотропии. При этом из соображений симметрии максимальная энергия будет достигаться тогда, когда эта проекция равна нулю, а намагниченности двух других подрешеток лежат в одной плоскости с другими осями анизотропии. Пусть в этом случае δ — угол отклонения намагниченностей двух других подрешеток от 120° . Тогда энергия системы в расчете на один атом

$$W_{\text{saddle}} = -\frac{2K}{3} \cos^2 \left(\frac{\pi}{12} - \delta \right) - \frac{4J_{AF}}{3} \left[2 \cos \left(\frac{2\pi}{3} + \delta \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{3} - 2\delta \right) \right],$$

откуда уравнение на δ

$$-\frac{2K}{3} \sin\left(\frac{\pi}{6} - 2\delta\right) + \frac{8J_{AF}}{3} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{3} + \delta\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{3} - 2\delta\right) \right] = 0,$$

или

$$-K \sin\frac{\pi}{6} + 2K\delta \cos\frac{\pi}{6} - 6J_{AF}\delta = 0, \quad \delta \approx -\frac{K}{6J_{AF}} \sin\frac{\pi}{6}.$$

В итоге, высота барьера между двумя соседними состояниями S (отличающимися направлением намагниченности только одной подрешетки) в расчете на один атом

$$\Delta_{WS} = W_{\text{saddle}} - W_{\text{min}} \approx 0.056K, \quad K \ll |J_{AF}|.$$

Это выражение является лишь оценкой — в зависимости от соотношения K и J_{AF} а так же влияния ферромагнитной подложки, величина барьера Δ_{WS} может меняться по крайней мере в разы.

Методы минимизации энергии

При моделировании «атом-в-атом» эволюция намагниченностей атомов образца описывается системой ОДУ Ландау–Лифшица:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} &= -\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha\gamma [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]], \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{m}_i}, \end{aligned}$$

где \mathbf{m}_i — единичный вектор, сонаправленный магнитному моменту i -го атома, $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$ — эффективное поле, действующее на i -й атом, γ — гиромагнитное соотношение, α — коэффициент диссипации, $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$ — эффективное поле, μ_s — модуль магнитного момента, W — полная энергия системы.

Поскольку в реальных системах $\alpha \ll 1$, член $\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]$, отвечающий за прецессию, накладывает серьезные ограничения на шаг интегрирования по времени — при поиске минимума энергии этим членом, как правило, пренебрегают. Тем не менее, для рассматриваемой задачи моделирование «атом–в–атом» имеет слишком высокую вычислительную сложность — поскольку изучаемый эффект крайне слабо выражен, время релаксации системы к стационарному состоянию оказывается весьма значительным. Моделирование «атом–в–атом» в данном случае оправдано лишь при учете температурных флуктуаций, что выходит за рамки настоящей работы.

Хорошим приближением для данной задачи является модель, состоящая из N_l атомарных слоев, параллельных плоскости интерфейса, каждый слой содержит три подрешетки антиферромагнетика, намагниченность которых внутри

слоя считается постоянной. Энергия такой системы в расчете на **один атом интерфейса** может быть записана как

$$W = -\frac{J_{\text{FAF}}}{3} \sum_{i=1}^3 \mathbf{m}_{i,1} \cdot \mathbf{m}_F - \sum_{l=1}^{N_l} \left\{ \frac{K}{3} \sum_{i=1}^3 (\mathbf{m}_{i,1} \cdot \mathbf{n}_{Ki})^2 + \frac{J_{\text{AF}}}{6} \mathbf{m}_{l,i} \cdot \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^3 (\mathbf{m}_{l-1,j} + 2\mathbf{m}_{l,j} + \mathbf{m}_{l+1,j}) \right\},$$

где $\mathbf{m}_{l,i}$ — намагниченность подрешетки i в слое l , при $l < 1$ или $l > N_l$ намагниченность считается нулевой. Тогда эффективное поле

$$\mathbf{H}_{l,i}^{\text{eff}} = J_{\text{FAF}} \mathbf{m}_F \delta_l^1 + 2K \mathbf{n}_{Ki} (\mathbf{m}_{i,l} \cdot \mathbf{n}_{Ki}) + J_{\text{AF}} \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^3 (\mathbf{m}_{l-1,j} + 2\mathbf{m}_{l,j} + \mathbf{m}_{l+1,j}).$$

При дальнейших расчетах мы будем ориентироваться на параметры магнитных взаимодействий, приведенные в работах [1, 2]. Значение интеграла обменного взаимодействия в антиферромагнетике:

$$J_{\text{AF}} = -40 \text{meV/link},$$

Ориентировочное значение обменного интеграла на интерфейсе:

$$J_{\text{FAF}} = 26 \text{meV/link}.$$

Ориентировочное значение коэффициента анизотропии:

$$K = 1.5 \text{meV/link}.$$

Магнитный момент атома Mn:

$$\mu_s = 2.63 \mu_B.$$

Период ячейки IrMn_3 :

$$a_{\text{IrMn}} = 3.785 \text{\AA}.$$

Коэффициент диссипации:

$$\alpha = 0.1.$$

Далее, все величины приводятся в безразмерной системе единиц, в качестве единицы энергии выбрана энергия одной связи антиферромагнетика.

Рассматривались широкие диапазоны значений физических параметров с логарифмической шкалой: $J_{\text{FAF}} \in [0.01 : 2]$ с шагом $\times 1.1$ и $K \in [10^{-6} : 1]$ с

шагом $\times 1.3$. Для каждой пары значений рассматривались ориентации намагниченности ферромагнитной подложки с $\varphi_F = 0^\circ, 5^\circ, \dots, 360^\circ$.

Для минимизации энергии использовался модифицированный метод Ла Бонте [17]:

$$\mathbf{m}_{i,l}^{n+1} = \left(\mathbf{m}_{i,l}^n + \frac{\mathbf{H}_{i,l}^{\text{eff } n}}{|\mathbf{H}_{i,l}^{\text{eff } n}|} \right) / \left| \mathbf{m}_{i,l}^n + \frac{\mathbf{H}_{i,l}^{\text{eff } n}}{|\mathbf{H}_{i,l}^{\text{eff } n}|} \right|,$$

целевой уровень максимальной ошибки по ориентации намагниченности любой подрешетки любого слоя $\varepsilon = 10^{-8}$, максимальное количество итераций $N_{\text{iter}}^{\text{max}} = 10^6$. Метод реализован в виде кода на языках C++ и Python для OS Linux с применением библиотеки aiwlib [18].

Начальные условия отвечали шестому состоянию (с оптимальным $\varphi_F = 0^\circ$) и $\varphi_{F0} = 0^\circ$, далее полученная стационарная конфигурация магнитных моментов использовалась как начальные условия для следующего значения угла φ_F , что отвечает квазистационарному развороту ферромагнитной подложки. При этом изучалась зависимость энергии стационарного состояния W от ориентации намагниченности ферромагнитной подложки φ_F .

Число слоев N_l принимало значения $N_l = 1, 2, 3, 4, 7, 13, 26, 51$, целевым значением являлось $N_l = 51$. Для каждого значения N_l проведено 3078 расчетов, общее число расчетов — более 24 тысяч, суммарное время счета 268 ядрочасов на CPU, объем полученных данных 11 GB.

Результаты для образца толщиной 51 слой

Образец толщиной в 51 слой соответствует антиферромагнетику IrMn_3 толщиной $51\sqrt{3}/2a \approx 17\text{nm}$.

На рисунке 5 приведены максимальный уровень ошибки ε_{max} (а) и максимальное количество итераций $N_{\text{iter}}^{\text{max}}$ (б). Видно, что, за исключением некоторых выбросов, на сепаратрисе, отделяющей два режима, $\varepsilon_{\text{max}} \approx 10^{-6}$, а в основной области $\varepsilon_{\text{max}} < 10^{-8}$; за исключением сложного нижнего правого угла, где при малых K и больших J_{FAF} происходит «прокручивание» антиферромагнетика (смена состояний S при изменении угла φ_F), $N_{\text{iter}}^{\text{max}} \approx 10 \div 10^3$.

На рисунке 5 приведено число конечных состояний* (в) и количество минимумов энергии N_{min}^W на зависимости $W(\varphi_F)$ (г). Видно, что, за исключением правого нижнего угла ($J_{\text{FAF}} > 0.105$, $K < 0.01$), для всех φ_F реализуется единственное конечное состояние, т.е. антиферромагнетик зафиксирован. В правом нижнем углу существует несколько конечных состояний, т.е. антиферромагнетик «прокручивается» по мере вращения ферромагнитной подложки. Все пространство можно разбить на три области: Ω_1 (1 минимум энергии), Ω_2 (2 минимума энергии) и Ω_{unstable} (3 минимума энергии и более) что отвечает «прокручиванию»

*Здесь и далее под числом конечных состояний мы будем понимать то, сколько различных состояний S принимает антиферромагнетик в процессе вращения намагниченности подложки, т.е. в процессе изменения угла $\varphi_F \in [0, 2\pi]$.

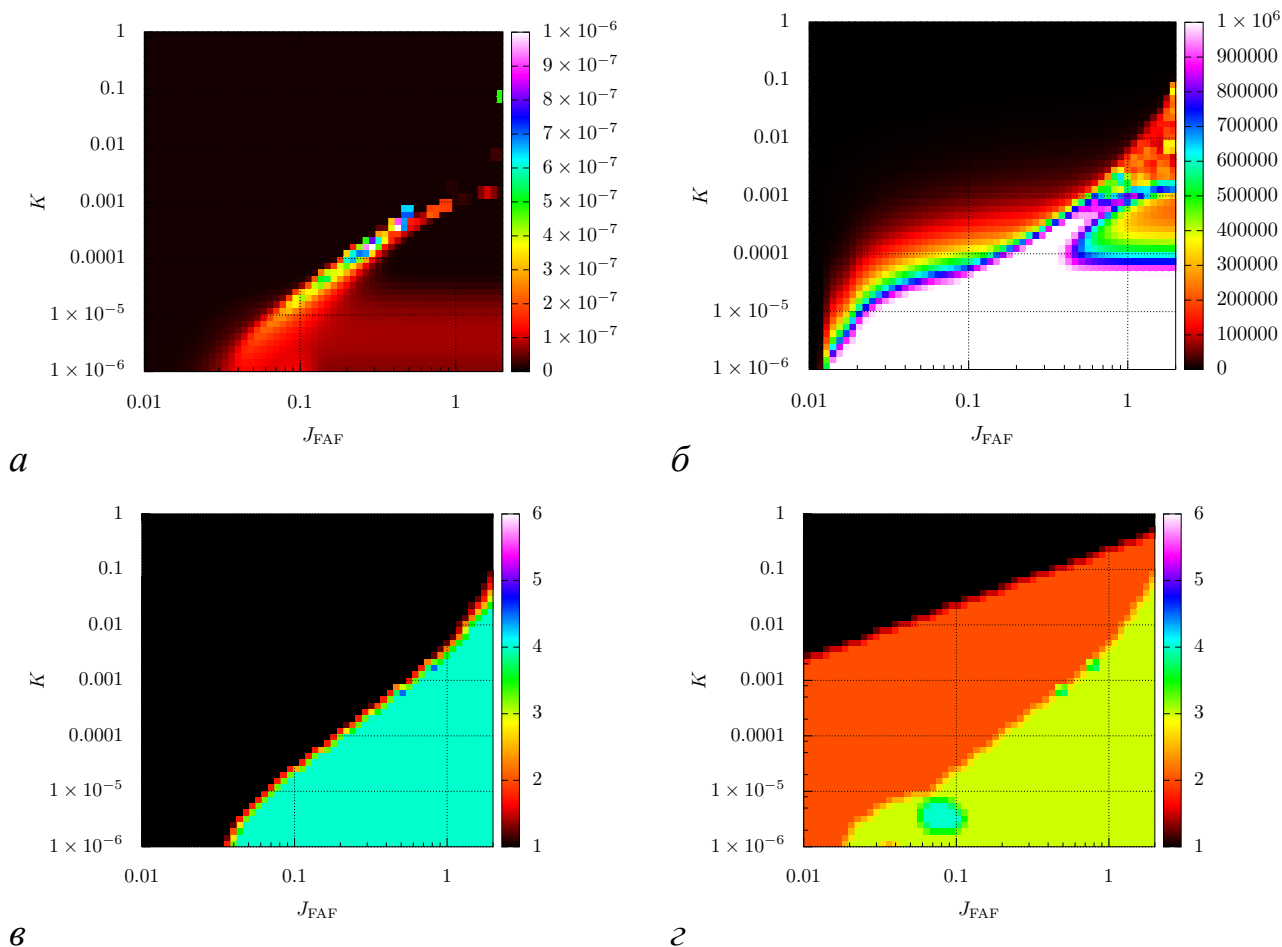


Рис. 5. Максимальный уровень ошибки ε_{\max} (а) и максимальное число итераций N_{iter}^{\max} (б) при решении исходной системы уравнений для $N_l = 51$; число конечных состояний (в) и число минимумов энергии (г) на зависимости $W(\varphi_F)$.

антиферромагнетика по мере вращения ферромагнитной подложки, при этом происходит смена конечных состояний для разных φ_F . В остальных областях антиферромагнетик зафиксирован.

Типичный вид зависимостей $W(\varphi_F)$ для разных областей Ω приведен на рисунках 6, 7.

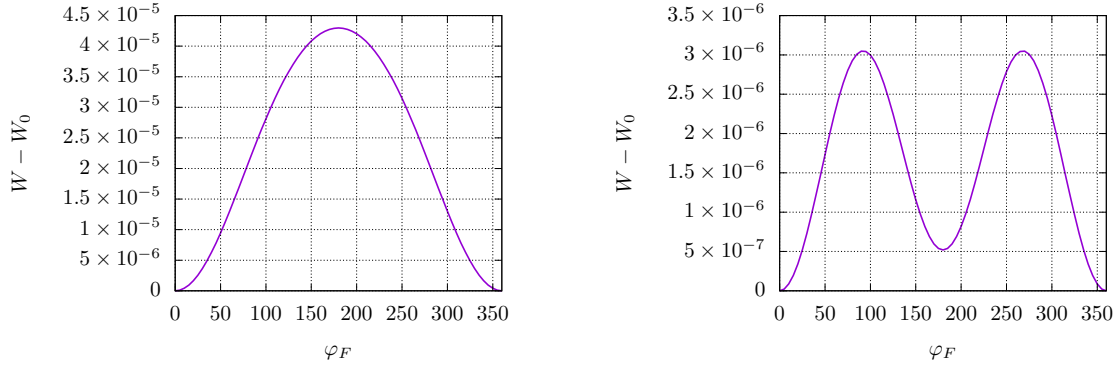
В областях $\Omega_{1,2}$ зависимость $W(\varphi_F)$ можно аппроксимировать функцией

$$W(\varphi_F) \approx C_0 + C_1 \cos \varphi_F + C_2 \cos^2 \varphi_F. \quad (1)$$

Ошибка аппроксимации приведена на рисунке 8а. Значения коэффициентов аппроксимации C_1 и C_2 приведены на рисунке 8в, г. Видно, что в областях $\Omega_{1,2}$ с хорошей точностью

$$C_1 \approx -2.1 \cdot 10^{-3} K J_{\text{FAF}}, \quad C_2 \approx -2.5 \cdot 10^{-4} J_{\text{FAF}}^2.$$

В области Ω_{unstable} аппроксимация (1) уже не работает, однако в этой области разницу между максимальной энергией W_{\max} и минимальной энергией



$\Omega_1 : J_{\text{FAF}} = 0.1065, K = 0.09575$ (а) $\Omega_2 : J_{\text{FAF}} = 0.1065, K = 0.0014$ (б)

Рис. 6. Характерный вид зависимости $W(\varphi_F)$ из области с одними (а) и двумя минимумами (б).

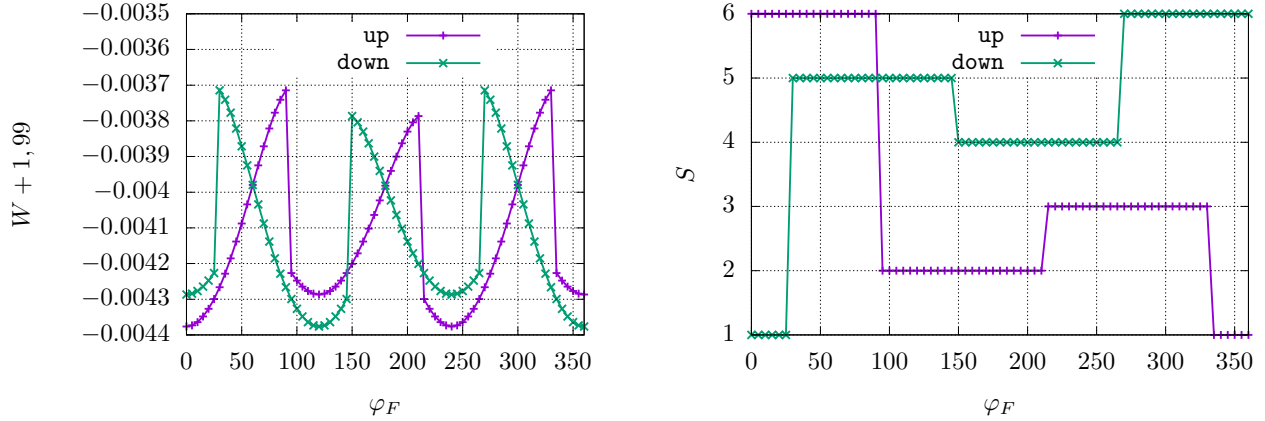


Рис. 7. Характерный вид зависимостей $W(\varphi_F)$ и $S(\varphi_F)$ из нестабильной области ($J_{\text{FAF}} = 2, K = 0.0118979$), в которой происходят «прокручивание» антиферромагнетика и смена состояний S при изменении φ_F от 0° до 360° и обратно.

$W_0 = W|_{\varphi_F=0^\circ}$ можно трактовать как величину барьера Δ_{WS} между состояниями антиферромагнетика. На рисунке 8б приведена зависимость величины $(W_{\text{max}} - W_0)/K$ от J_{FAF} и K . Видно, что в области Ω_{unstable} в первом приближении

$$\Delta_{WS} = W_{\text{max}} - W_0 \approx 0.08...0.17K.$$

Из (1) легко получить оценку параметров, при которых возникает два минимума энергии и происходит переход из области Ω_1 в область Ω_2 . Условие экстремума

$$\frac{dW}{d\varphi_F} = -C_1 \sin \varphi_F - 2C_2 \sin \varphi_F \cos \varphi_F = 0,$$

всегда присутствуют экстремумы при $\varphi_F = 0$ и $\varphi_F = \pi$, условие на появление дополнительного экстремума

$$\cos \varphi_F = -\frac{C_1}{2C_2}, \quad |C_1| = 2|C_2|, \quad K \approx 0.24 \cdot J_{\text{FAF}}. \quad (2)$$

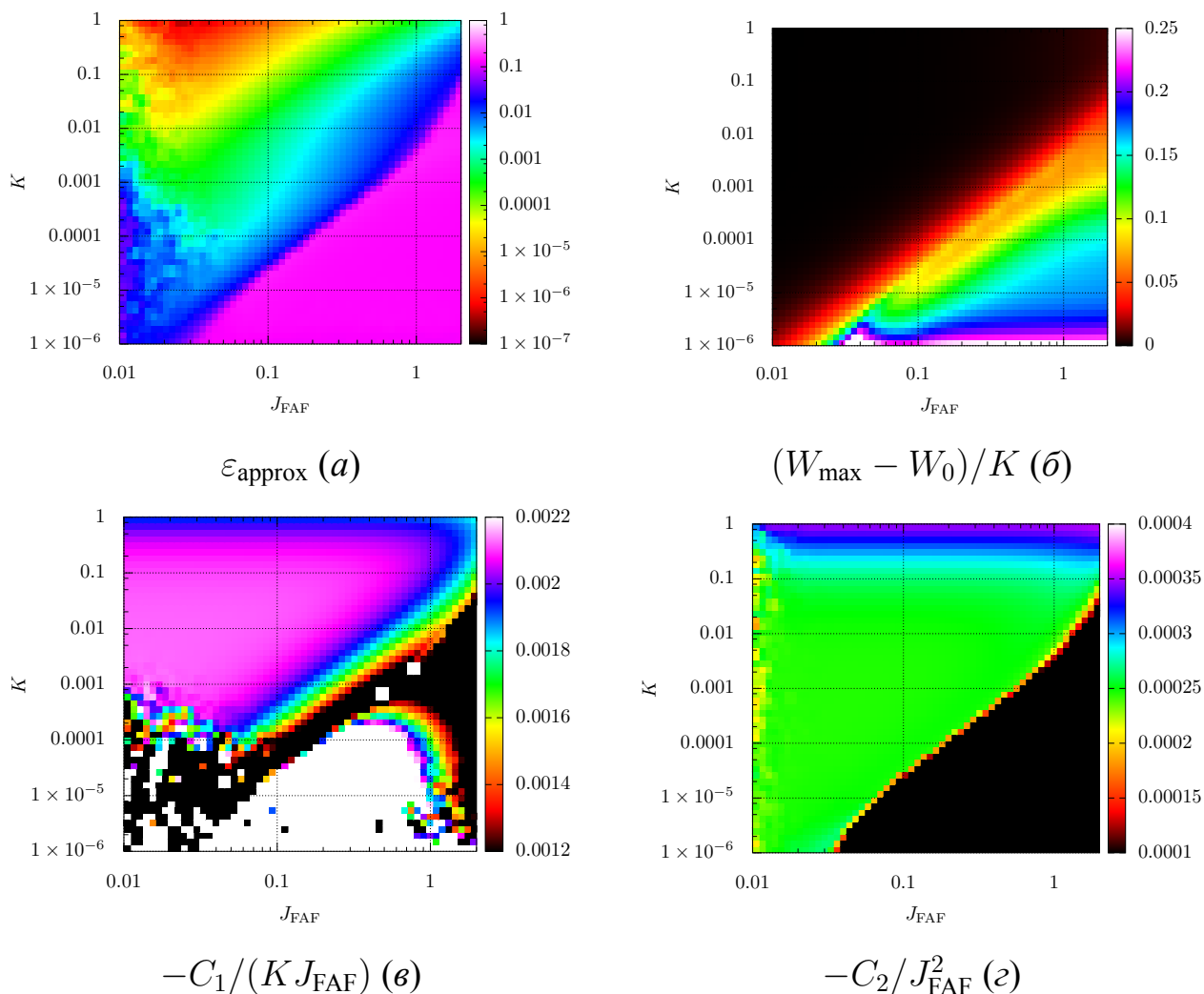


Рис. 8. Ошибка аппроксимации зависимости $W(\varphi_F)$ на основе (1) (рис. а), зависимости $(W_{\text{max}} - W_0)/K$ (рис. б), $C_1/(K J_{\text{FAF}})$ (рис. в) и C_2/J_{FAF}^2 (рис. г).

ЗАВИСИМОСТЬ ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ОТ ЧИСЛА СЛОЕВ

В первую очередь, рассмотрим изменение границ между областями $\Omega_{1,2,\text{unstable}}$ для различного числа слоев, рисунок 9. Видно, что сепаратриса между областями $\Omega_{1,2}$ от числа слоев практически не зависит — это означает, что согласно (2) для всех N_l с хорошей точностью выполняется соотношение

$$\frac{C_1}{C_2} = 12 \frac{K}{J_{\text{FAF}}}.$$

Сепаратриса между областями $\Omega_{2,\text{unstable}}$ сдвигается вправо–вниз по мере увеличения числа слоев, что вполне объяснимо с энергетической точки зрения — чем больше число слоев, тем выше энергетический барьер между состояниями антиферромагнетика, и тем меньше должна быть анизотропия и больше обмен на интерфейсе для переключения антиферромагнетика.

На рисунках 10 и 11 приведены значения $-C_1/K J_{\text{FAF}}$ и $-C_2/J_{\text{FAF}}^2$ для различных толщин слоев, на рисунке 12 приведена зависимость барьера Δ_{WS} между

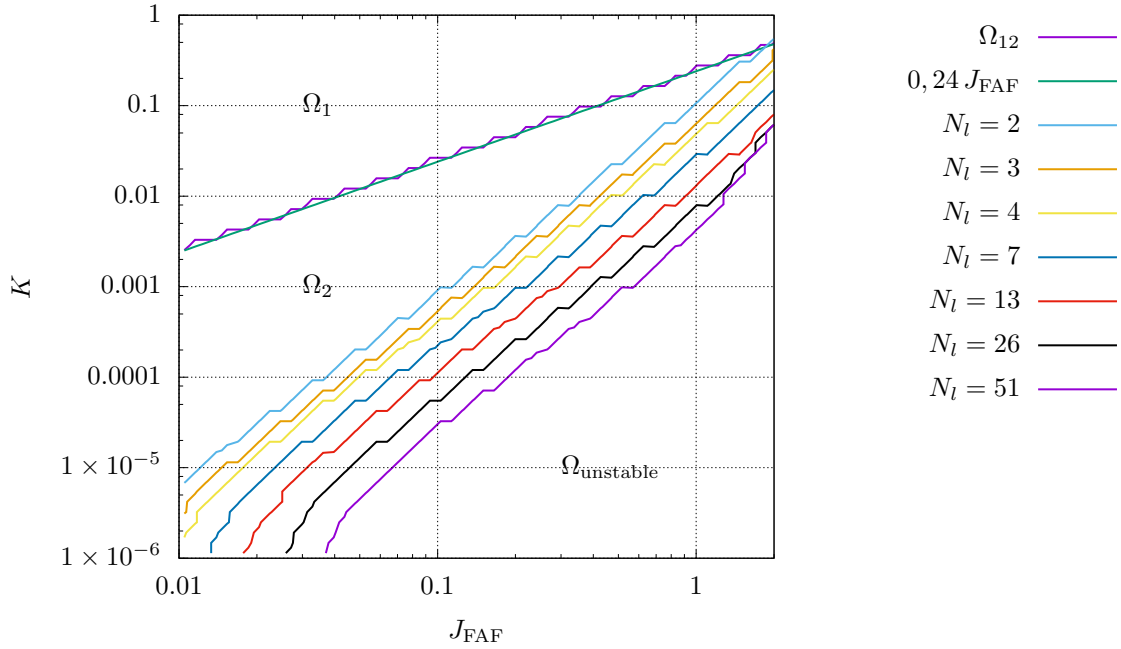


Рис. 9. Сепаратрисы между областями $\Omega_{1,2,\text{unstable}}$ для различного числа слоев N_l . Сепаратриса между областями $\Omega_{1,2}$ от числа слоев практически не зависит.

состояниями антиферромагнетика. Зависимость коэффициентов $C_{1,2}$ и барьера Δ_{WS} от числа слоев N_l приведена на рисунке 13.

Поскольку энергия рассчитывалась на один атом (в слое) системы, для оценки анизотропии интерфейса необходимо умножить ее на число слоев. В этом случае видно, что значения выражений $N_l C_1 / K J_{\text{FAF}}$ и $N_l C_2 / J_{\text{FAF}}^2$ не зависят от числа слоев, т.е. в областях $\Omega_{1,2}$, на некотором удалении от сепаратрисы $\Omega_{2\text{unstable}}$, энергию **в расчете на один магнитный атом интерфейса антиферромагнетика** можно записать как

$$W^*(\varphi_F) = N_l W(\varphi_F) \approx C_0^*(J_{\text{FAF}}, K) - \frac{1}{10} J_{\text{FAF}} \left[K \cos \varphi_F + \frac{J_{\text{FAF}}}{12} \cos^2 \varphi_F \right]. \quad (3)$$

В свою очередь, барьер Δ_{WS} между состояниями антиферромагнетика в области Ω_{unstable} **в расчете на один магнитный атом интерфейса антиферромагнетика** линейно зависит от числа слоев и может быть записан как

$$\Delta_{WS}^* = N_l \Delta_{WS} \approx 0.175 N_l K f_W(J_{\text{FAF}}, K), \quad (4)$$

где f_W — некоторая сложная функция от J_{FAF} и K , $f_W \approx 0.7 \div 1.7$, в большей части области Ω_{unstable} функция $f_W \approx 1$.

Однослойная (макроспиновая) модель

В отличие от многослойной модели (даже при $N_l = 2$), однослойная модель не имеет области с двумя минимумами энергии Ω_2 — область Ω_1 непо-

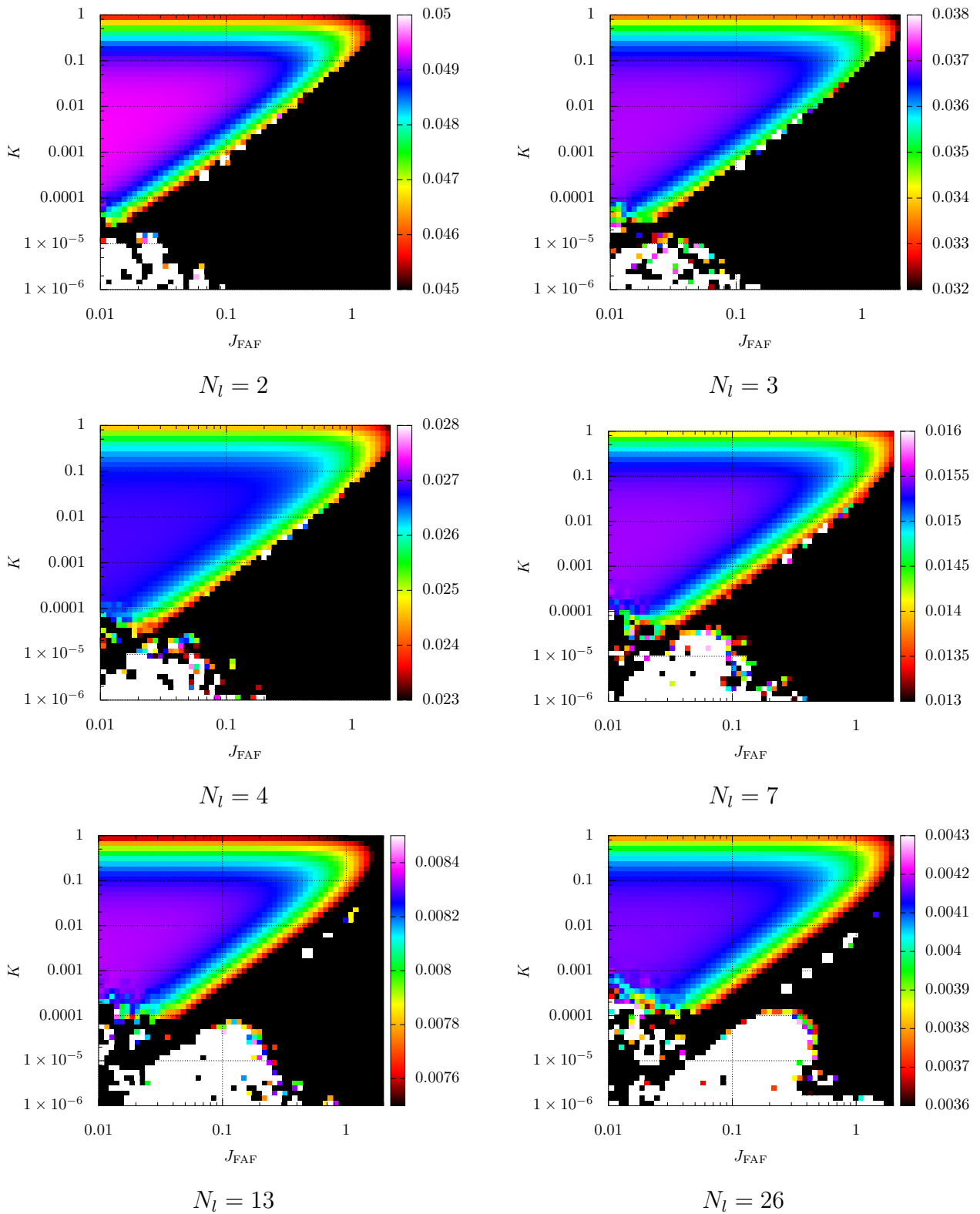


Рис. 10. Зависимости выражения $-C_1/K J_{\text{FAF}}$ от J_{FAF} и K для различного числа слоев

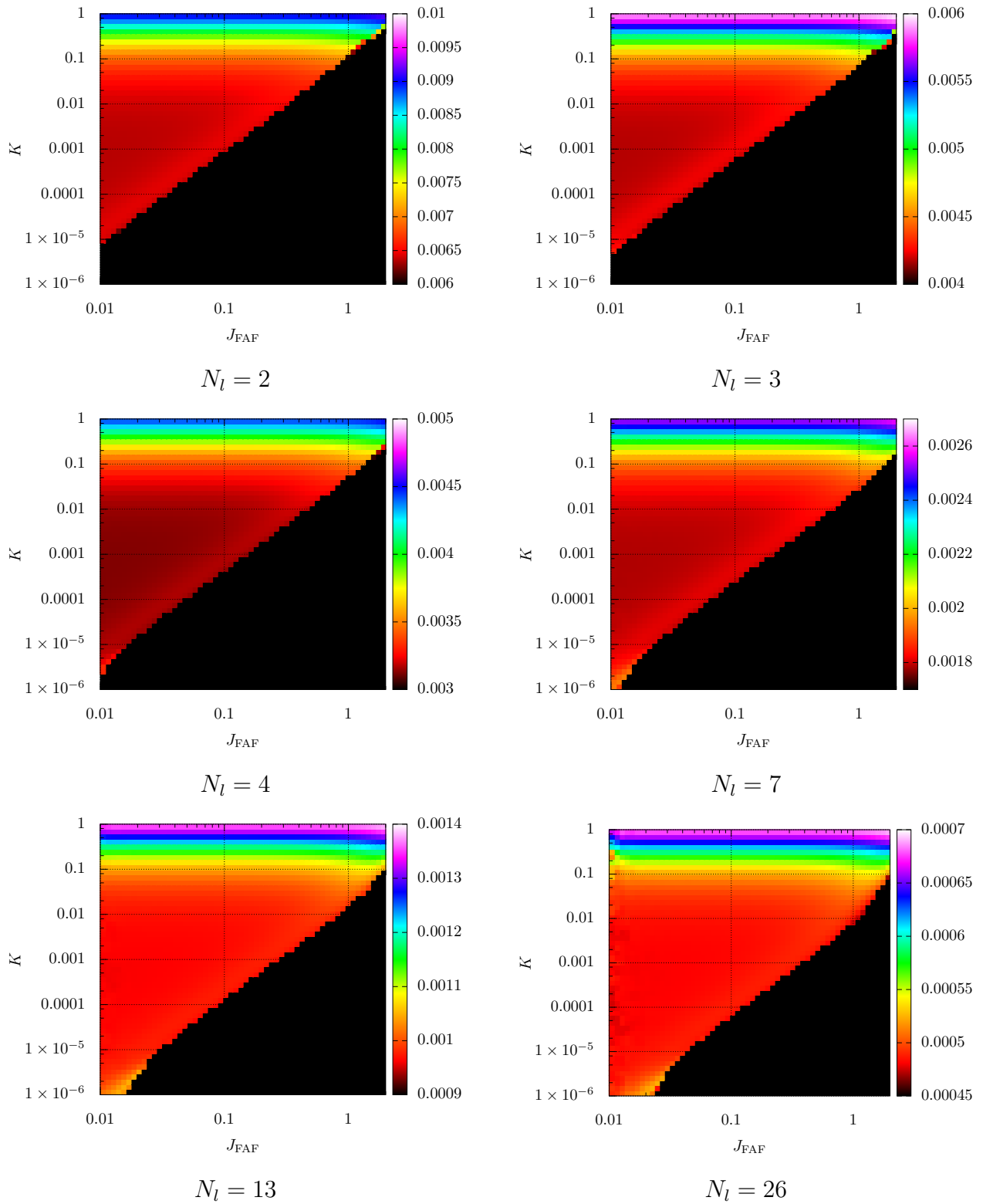


Рис. 11. Зависимости выражения $-C_2/J_{\text{FAF}}^2$ от J_{FAF} и K для различного числа слоев

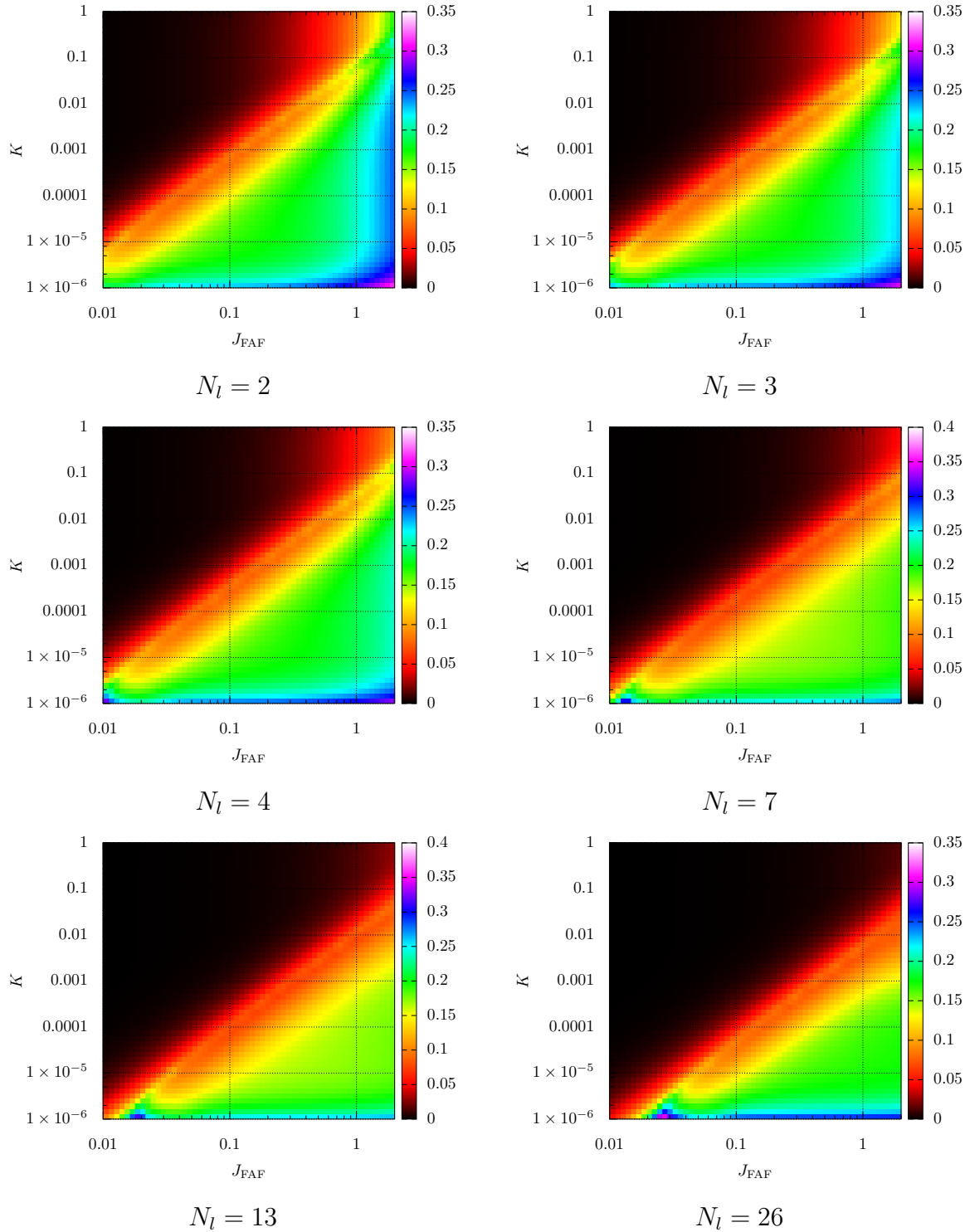


Рис. 12. Зависимости выражения Δ_{WS}/K , $\Delta_{WS} = (W_{\max} - W|_{\varphi_F=0})$ от J_{FAF} и K для различного числа слоев

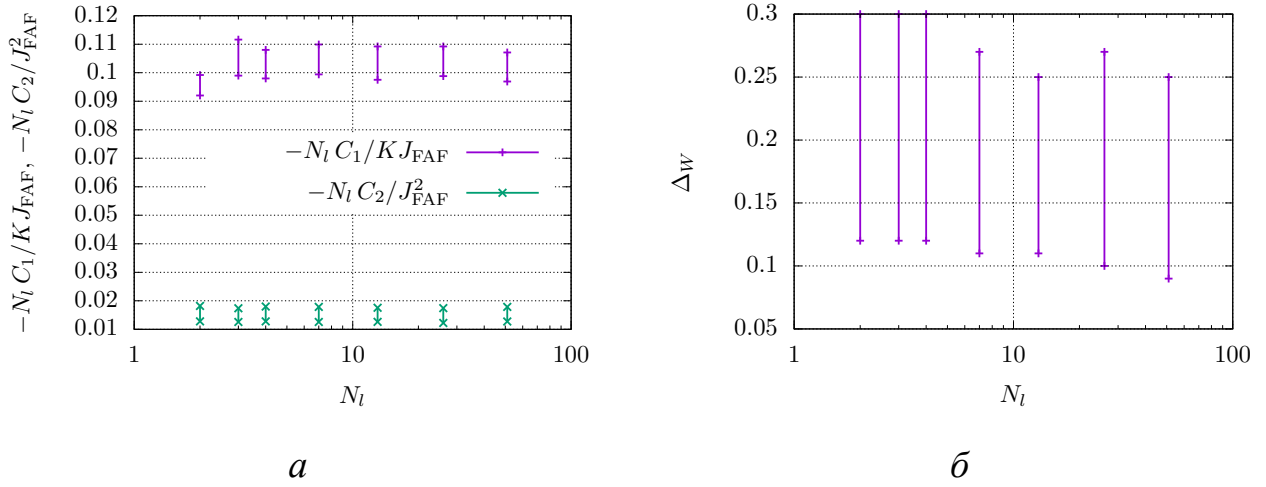


Рис. 13. Зависимость коэффициентов $C_{1,2}$ и барьера Δ_{WS} от числа слоев N_l .

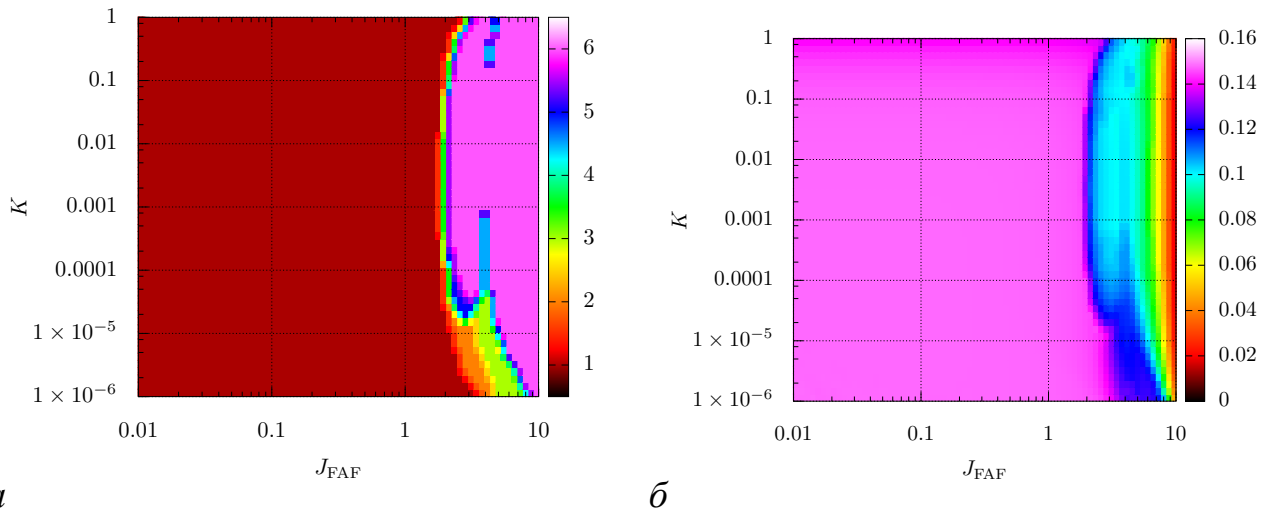


Рис. 14. Зависимости числа конечных состояний (а) и величины $(W_{\text{max}} - W|_{\varphi_F=0^\circ}) / K J_{\text{FAF}}$ (б) для однослойной (макроспиновой) модели.

средственно граничит с областью Ω_{unstable} , при этом сепаратриса расположена в пространстве J_{FAF}, K практически вертикально при $J_{\text{FAF}} \approx 2$, рисунок 14 а.

Во всей области Ω_1 хорошо работает аппроксимация энергии

$$W(\varphi_F) \approx C_0 + \frac{1}{6} K J_{\text{FAF}} \cos \varphi_F, \quad (5)$$

рисунок 14 б. В области Ω_{unstable} ситуация значительно усложняется — барьер между состояниями антиферромагнетика монотонно падает по мере роста J_{FAF} , при этом его поведение качественно похоже на поведение барьера для многослойной модели в области Ω_{unstable} , но в зависимости от K .

Эффективная двухслойная модель с «тяжелым» внутренним слоем

Результаты, полученные на двухслойной модели, качественно близки к результатам N -слойной, с точностью до некоторых коэффициентов. Поскольку двухслойная модель существенно проще с вычислительной точки зрения, попытаемся построить эффективную двухслойную модель, достаточно близкую по своим свойствам к N -слойной.

Рассмотрим систему из двух слоев, в которой внутренний (дальний от интерфейса) слой имеет вес $N_l - 1$. Энергия такой системы

$$\begin{aligned}
 W = & -J_{\text{FAF}} \mathbf{m}_F \cdot [\mathbf{m}_1^s + \mathbf{m}_2^s + \mathbf{m}_3^s] - K \left[(\mathbf{m}_1^s \mathbf{n}_{K1})^2 + (\mathbf{m}_2^s \mathbf{n}_{K2})^2 + (\mathbf{m}_3^s \mathbf{n}_{K3})^2 \right] - \\
 & - K(N_l - 1) \left[(\mathbf{m}_1^v \mathbf{n}_{K1})^2 + (\mathbf{m}_2^v \mathbf{n}_{K2})^2 + (\mathbf{m}_3^v \mathbf{n}_{K3})^2 \right] - \\
 & - 2J_{\text{AF}} \left[\mathbf{m}_1^s \mathbf{m}_2^s + \mathbf{m}_2^s \mathbf{m}_3^s + \mathbf{m}_3^s \mathbf{m}_1^s \right] - 2J_{\text{AF}}(N_l - 1) \left[\mathbf{m}_1^v \mathbf{m}_2^v + \mathbf{m}_2^v \mathbf{m}_3^v + \mathbf{m}_3^v \mathbf{m}_1^v \right] - \\
 & - J_{\text{AF}} \left[\mathbf{m}_1^s \mathbf{m}_2^v + \mathbf{m}_2^s \mathbf{m}_3^v + \mathbf{m}_3^s \mathbf{m}_1^v + \mathbf{m}_1^v \mathbf{m}_2^s + \mathbf{m}_2^v \mathbf{m}_3^s + \mathbf{m}_3^v \mathbf{m}_1^s \right], \quad (6)
 \end{aligned}$$

где $\mathbf{m}_{1,2,3}^s$ — намагниченности подрешеток интерфейсного слоя, $\mathbf{m}_{1,2,3}^v$ — намагниченности подрешеток внутреннего «тяжелого» слоя.

Результаты сравнения сепаратрис для исходной N -слойной модели и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем приведены на рисунках 15 и 16. Видно, что сепаратисы разных моделей между областями с одним и двумя минимумами энергии совпадают с хорошей точностью. Сепаратисы разных моделей между стабильной и нестабильной областями совпадают с хорошей точностью для малого числа слоев. По мере роста числа слоев начиная с $N_l \geq 13$ различия между сепаратрисами начинают нарастать, при этом сепаратриса двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем расположена ниже сепаратрисы исходной N -слойной модели, но качественно они совпадают.

Результаты сравнения коэффициентов C_1 , C_2 и $W_{\text{max}} - W_0$ для исходной N -слойной модели и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем приведены на рисунках 17, 18, 19, 20, 21 и 22. Видно, что коэффициент C_1 на 15-20% меньше для двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем; коэффициент C_2 на 20-30% меньше для двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (расхождение растет по мере роста числа слоев); коэффициенты $W_{\text{max}} - W_0$ довольно близки для двух моделей.

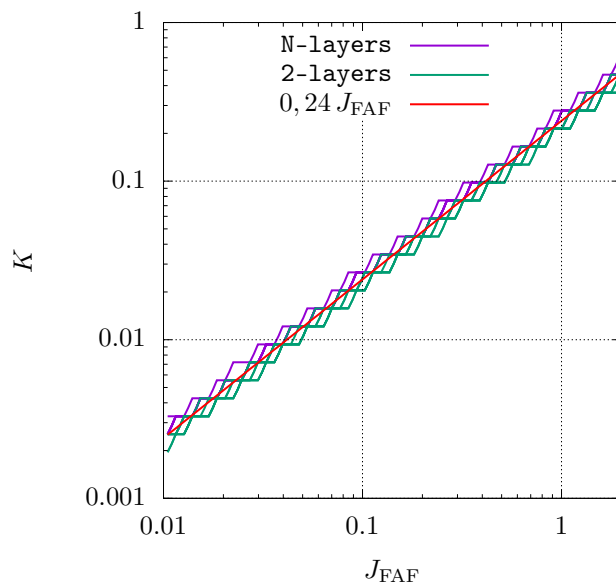


Рис. 15. Сравнение сепаратрис между областями с одним и двумя минимумами энергии для исходной N -слойной модели и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем.

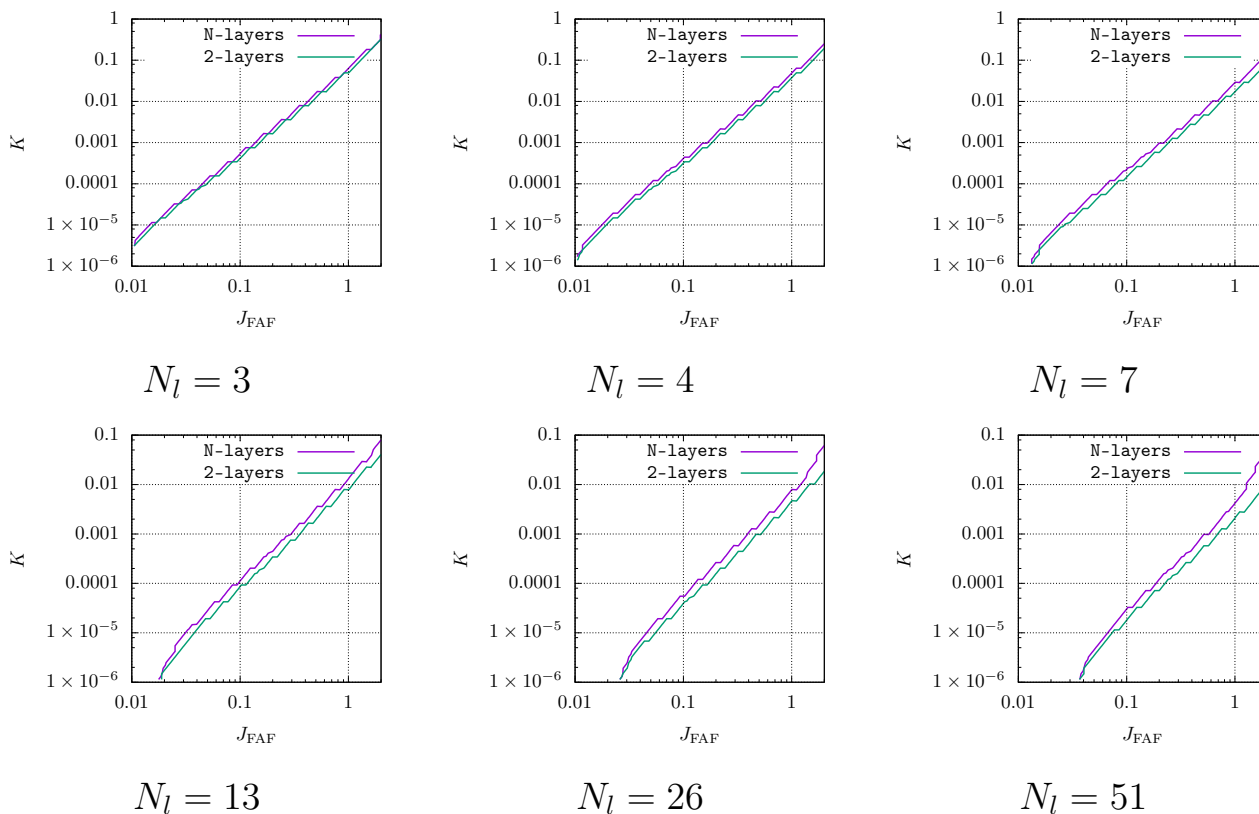


Рис. 16. Сравнение сепаратрис между стабильной и нестабильной областями для исходной N -слойной модели и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем.

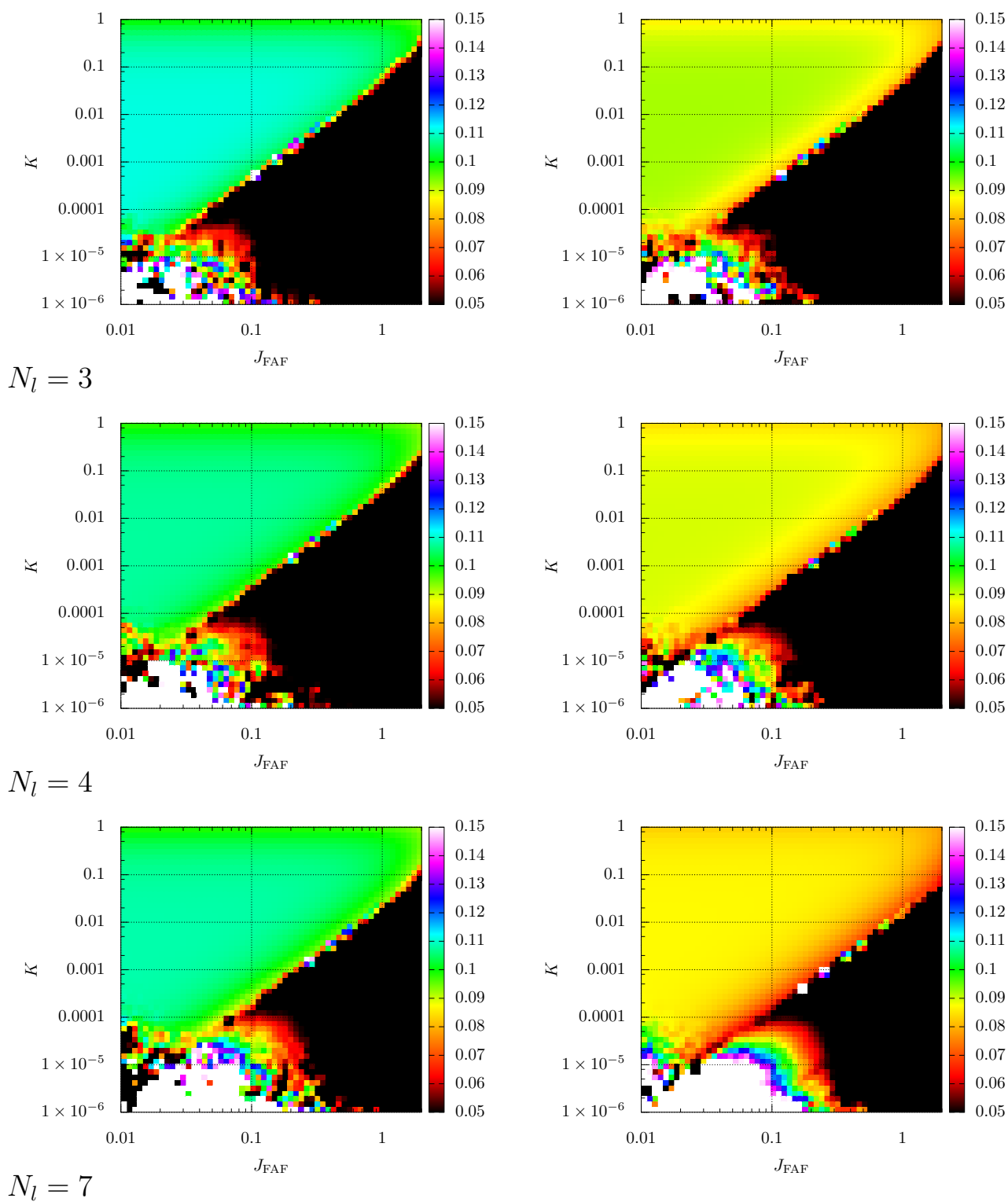


Рис. 17. Сравнение коэффициентов $C_1/J_{\text{FAF}}K$ для исходной N -слойной модели (слева) и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (справа).

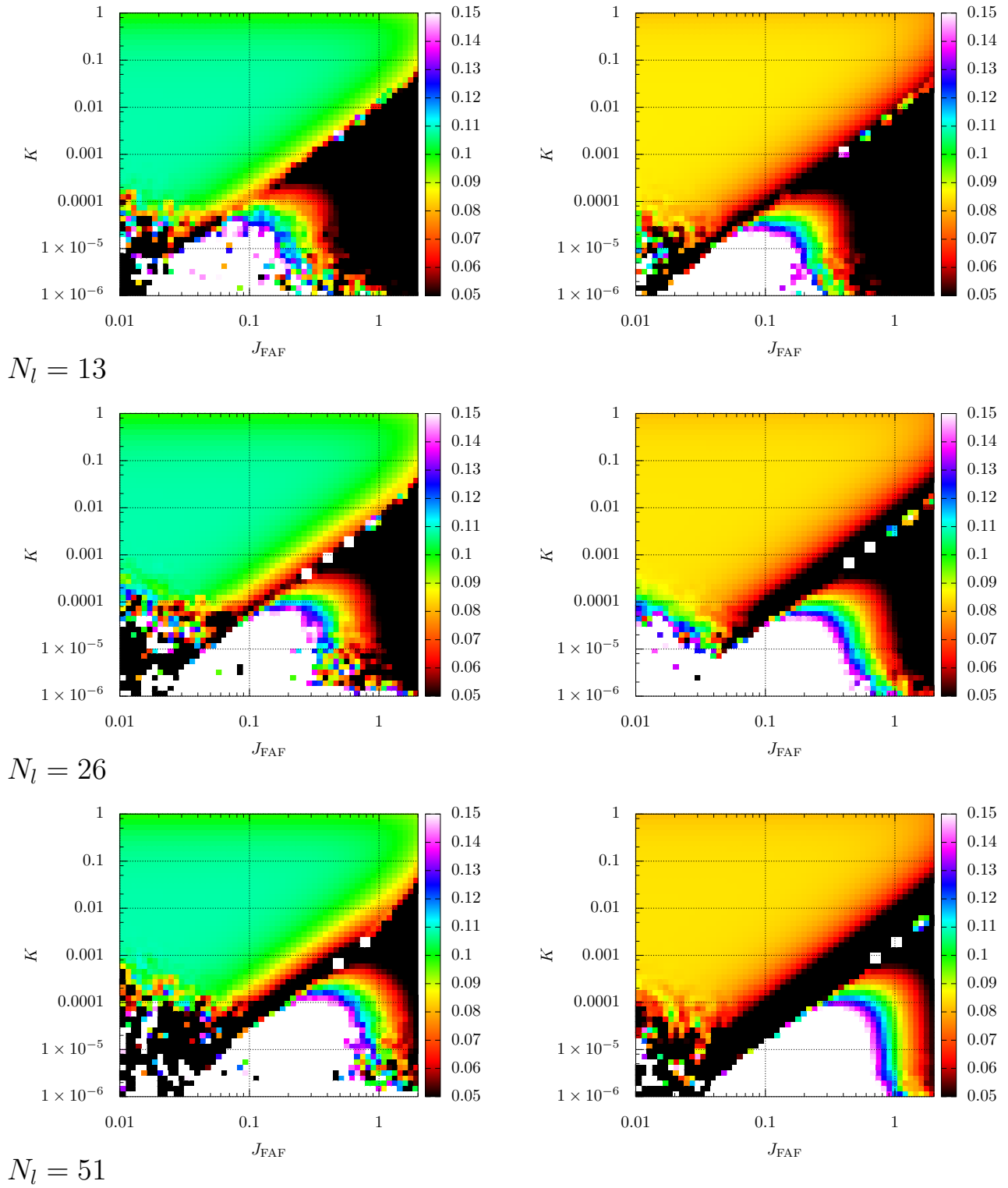


Рис. 18. Сравнение коэффициентов $C_1/J_{\text{FAF}}K$ для исходной N -слойной модели и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем.

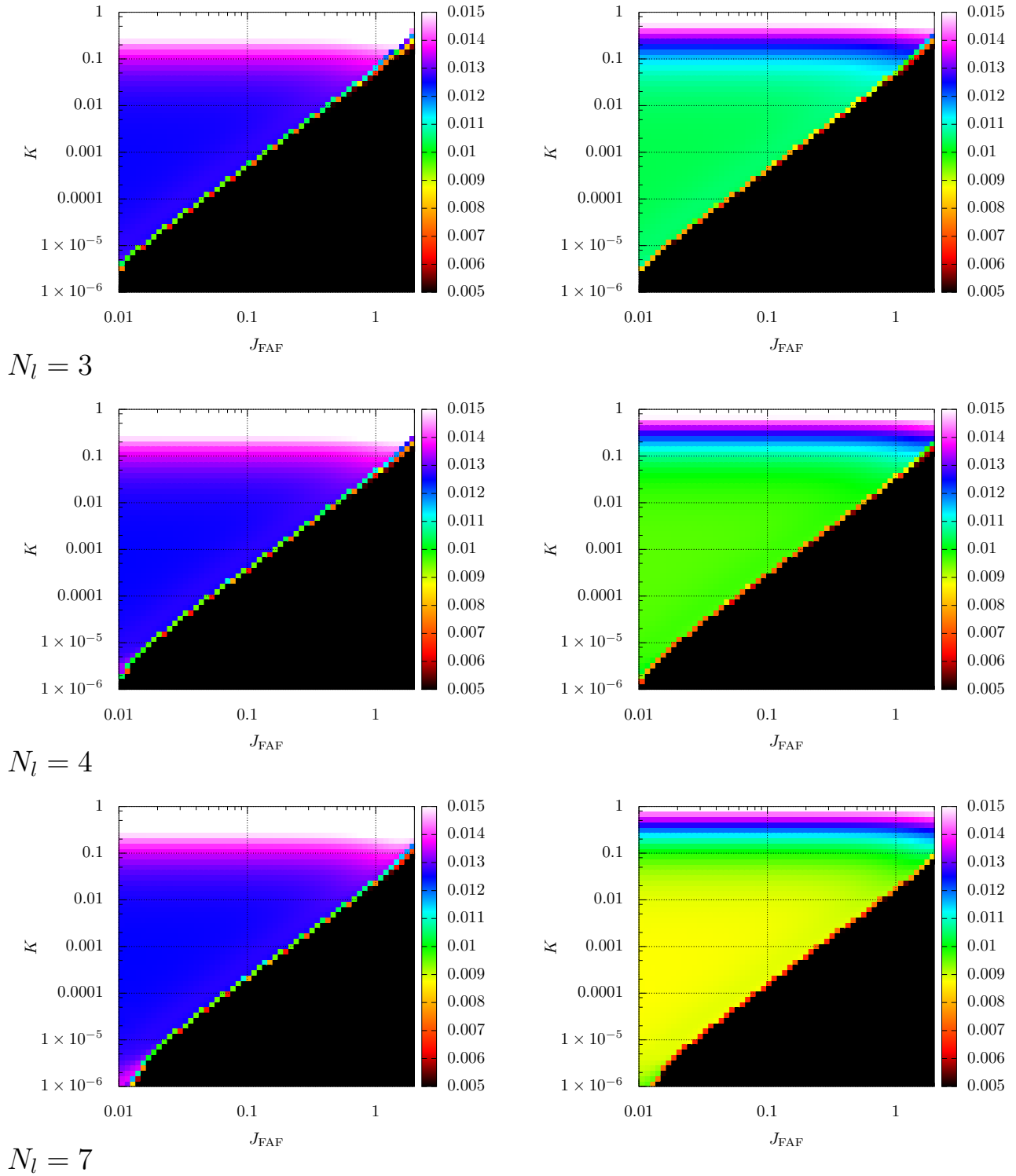


Рис. 19. Сравнение коэффициентов C_2/J_{FAF}^2 для исходной N -слойной модели (слева) и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (справа).

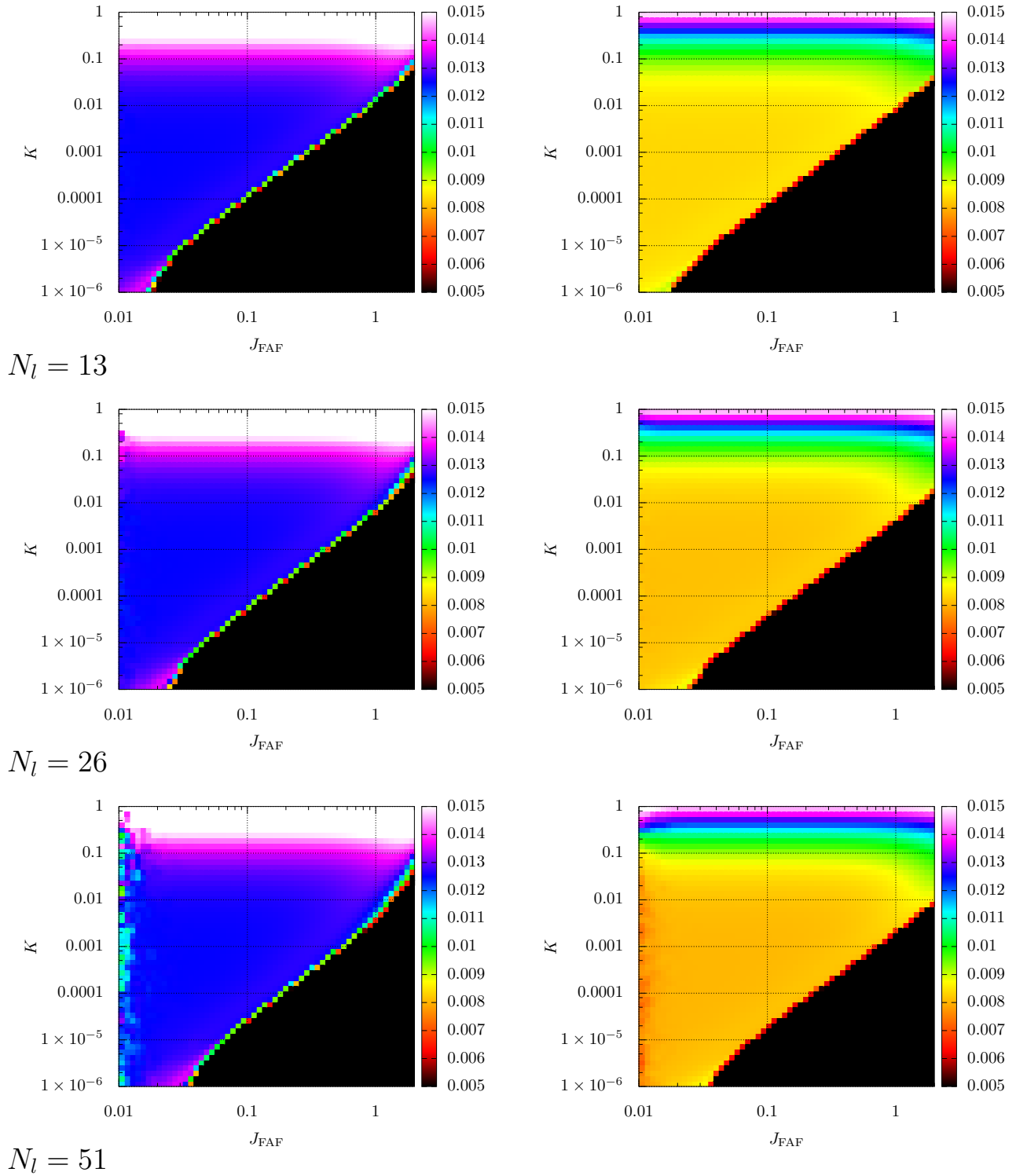


Рис. 20. Сравнение коэффициентов C_2/J_{FAF}^2 для исходной N -слойной модели (слева) и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (справа).

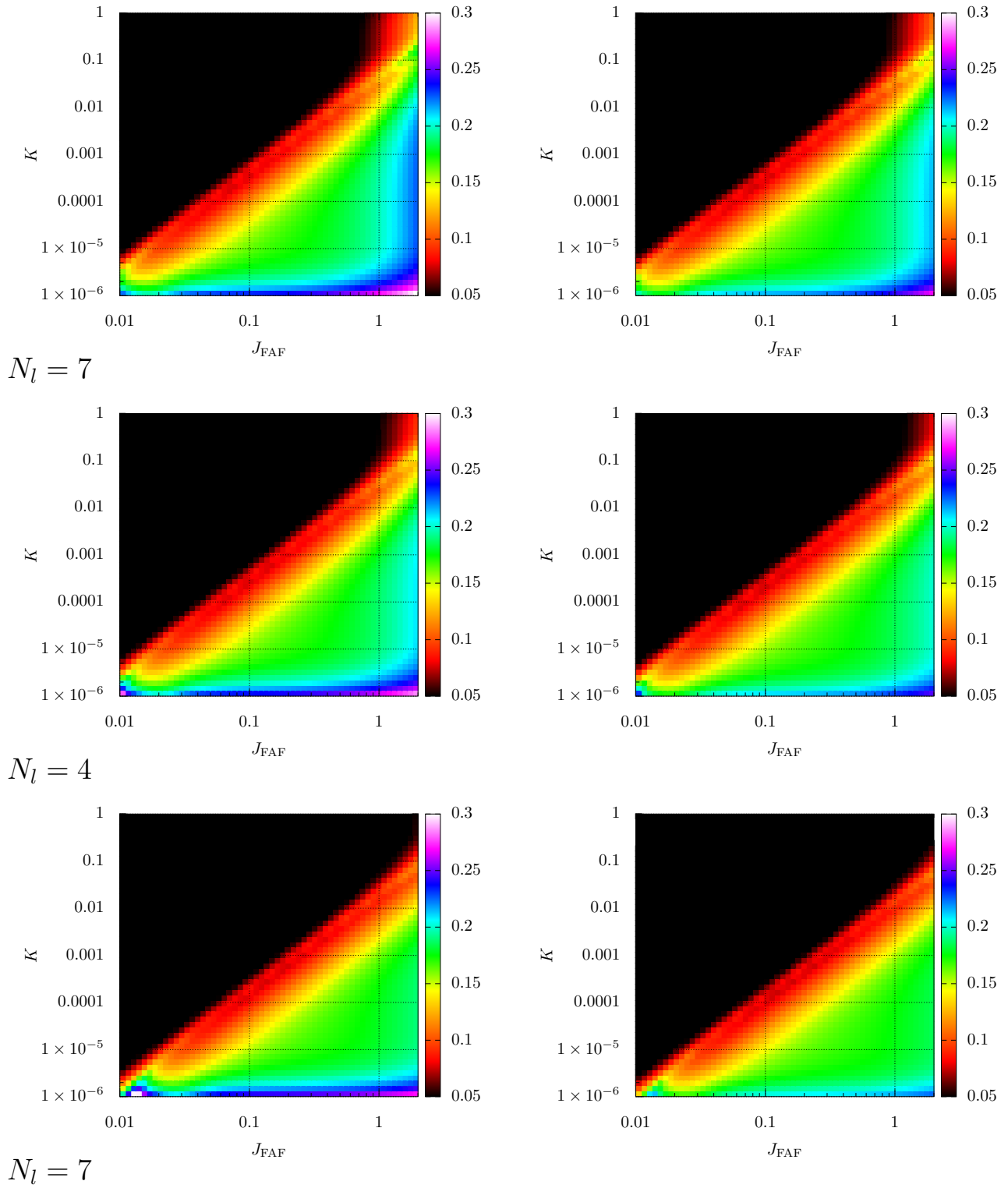


Рис. 21. Сравнение коэффициентов $(W_{\max} - W_0)/K N_l$ для исходной N -слойной модели (слева) и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (справа).

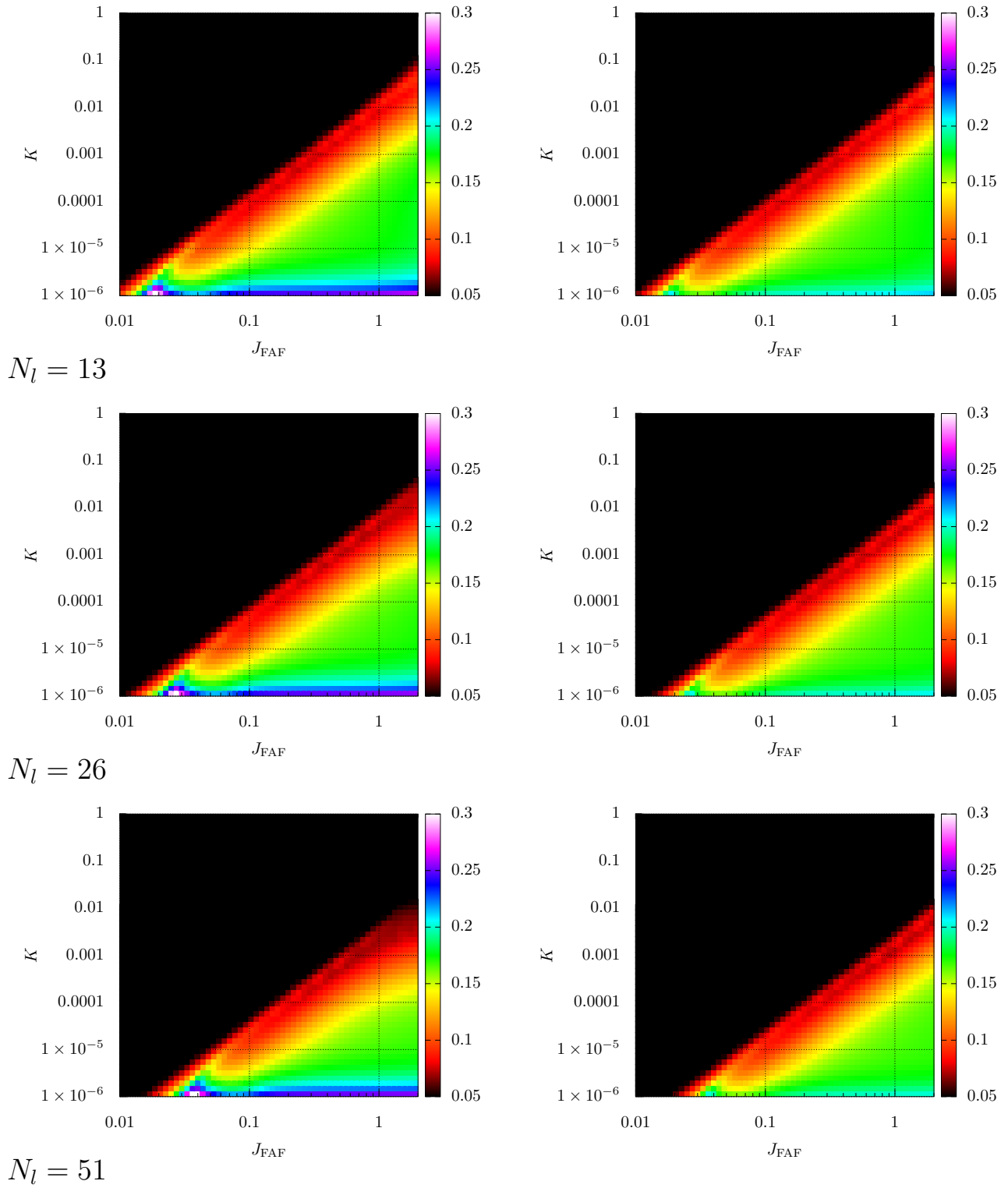


Рис. 22. Сравнение коэффициентов $(W_{\max} - W_0) / K N_l$ для исходной N -слойной модели (слева) и двухслойной модели с «тяжелым» внутренним слоем (справа).

Заключение

Ориентация оси анизотропии на интерфейсе антиферромагнетик–ферромагнетик определяется состоянием антиферромагнетика, при этом шесть возможных состояний $S = 1 \div 6$ задают три возможных оси анизотропии, перпендикулярных плоскости, содержащей намагниченности подрешеток антиферромагнетика, и еще два состояния $S = 0,7$ отвечают крайне слабо выраженной анизотропии и не представляют интереса. В зависимости от значения параметров анизотропии и обмена возможны как два минимума на зависимости энергии гетероструктуры от направления намагниченности ферромагнитного слоя $W(\varphi_F)$ (в том числе и неравноценных), так и один минимум.

Из расчетов видно, что многослойные модели (даже при двух слоях) качественно отличаются от однослойной (макроспиновой) модели: для многослойной модели в пространстве J_{FAF}, K существует область с двумя минимумами энергии $W(\varphi_F)$; для двухслойной модели граница области неустойчивости антиферромагнетика в пространстве J_{FAF}, K ведет себя как $K \approx 0.1 J_{\text{FAF}}^2$ и опускается по мере роста числа слоев, для однослойной модели эта граница расположена существенно правее и практически вертикальна, $J_{\text{FAF}} \approx 2$.

Это отличие, приводящее к появлению дополнительного члена в выражении, аппроксимирующем зависимость $W(\varphi)$, связано с неоднородностью намагничивания образца по толщине. Возмущение со стороны ферромагнитной подложки быстро затухает по мере удаления от границы, но его вклад в общую энергию системы оказывается существенно анизотропным.

Эффективная двухслойная модель с «тяжелым» внутренним слоем имеет минимальную вычислительную сложность, и при этом качественно и количественно (с точностью до первых десятков процентов) описывает многослойный антиферромагнетик. Для улучшения результатов можно по аналогии строить эффективные трех–четырёх слойные модели.

Построенные аппроксимации зависимости энергии системы и барьера между состояниями антиферромагнетика от ориентации намагниченности ферромагнитной подложки позволят делать оценки и строить эффективные модели переключения, процессов теплового переключения и деградации ячеек современных элементов магнитной памяти и логики, в том числе при решении инженерных задач, возникающих при разработке новых устройств.

Список литературы

- [1] Giant magnetic anisotropy of the bulk antiferromagnets IrMn and IrMn₃ from first principles / L. Szunyogh, B. Lazarovits, L. Udvardi et al. // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 79.

- [2] Atomistic spin model based on a spin-cluster expansion technique: Application to the IrMn₃/Co interface / L. Szunyogh, L. Udvardi, J. Jackson et al. // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 83.
- [3] Морозов А.И., Сигов А.С. Поверхностный спин-флоп-переход в антиферромагнетике // *УФН.* — 2010. — Т. 180. — С. 709–722.
- [4] Морозов А.И., Сигов А.С. Фрустрированные магнитные наноструктуры. — М.: Физматлит, 2017.
- [5] Radu F., Zabel H. Exchange Bias Effect of Ferro-/Antiferromagnetic Heterostructures // *STMP.* — 2007. — Vol. 227. — P. 97–184.
- [6] Meikljohn W.H. Exchange anisotropy — a review // *J.Appl. Phys.* — 1962. — Vol. 33. — P. 1328.
- [7] Malozemoff A.P. Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces // *Phys.Rev.B.* — 1987. — Vol. 35. — P. 3679.
- [8] Kim J.-V., Stamp R.L. Hysteresis from antiferromagnet domain-wall process in exchange-biased systems: Magnetic defects and thermal effects // *Phys.Rev.* — 2005. — Vol. 71, no. 9. — P. 094405.
- [9] O’Grady K., Fernandez-Outon L.E., Vallejo-Fernandez G. A new paradigm for exchange bias in polycrystalline thin films // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2010. — Vol. 322, no. 8. — P. 883–899.
- [10] Folcomer E., Charap S.H. Thermal fluctuation aftereffect model for some systems with ferromagnetic-antiferromagnetic coupling // *J.Appl.Phys.* — 1972. — Vol. 43, no. 10. — P. 4190–4199.
- [11] Nishioka K. Grain size effect on ferro-antiferromagnetic coupling of NiFe/FeMn systems // *J.Appl.Phys.* — 1996. — Vol. 80, no. 8. — P. 4528–4533.
- [12] Mixing antiferromagnets to tune NiFe-[IrMn/FeMn] interfacial spin-glasses, grains thermal stability, and related exchange bias properties / K. Akmaldinov, C. Ducruet, C. Portemont et al. // *J.Appl.Phys.* — 2014. — Vol. 115. — P. 17B718.
- [13] Ali M., Marrows C. H., Hickey B. J. Onset of exchange bias in ultrathin antiferromagnetic layers // *Phys.Rev.B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 172405.
- [14] Antiferromagnetic layer thickness dependence of the IrMn/Co exchange-bias system / M. Ali, C.H. Marrows, M. Al-Jawad et al. // *Phys.Rev.B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 214420.

- [15] First-principles study of the magnetic structures of ordered and disordered Mn-Ir alloys / A. Sakuma, K. Fukamichi, K. Sasao, R. Y. Umetsu // Phys. Rev. B. — 2003. — Vol. 67. — P. 024420.
- [16] Simple model for thin ferromagnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate / D.Mauri, H.C.Siegmann, P.S.Bagus, E.Kay. // J.Appl.Phys. — 1987. — Vol. 62. — P. 3047.
- [17] LaBonte A.E. Two dimensional Bloch type domain walls in ferromagnetic films // J.Appl.Phys. — 1969. — Vol. 40. — P. 2450–2458.
- [18] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib — инструмент для создания приложений численного моделирования, визуализации и анализа результатов // Научная визуализация. — 2018. — Vol. 10, no. 1. — P. 110–127.