Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 9, с. 610 – 614

Магнитные скирмионы и фазовые переходы в антиферромагнитном/ферроэлектрическом бислое

И. Ф. Шарафуллин[+ 1)], *Х. Т. Диеп*[* 2)]

[+]*Башкирский государственный университет, 450074 Уфа, Россия*

[*]*Laboratoire de Physique Theorique et Modelisation Université Cergy-Paris, CNRS, UMR 8089, 95302 Cergy-Pontoise, France*

Поступила в редакцию 18 сентября 2021 г.
После переработки 24 сентября 2021 г.
Принята к публикации 24 сентября 2021 г.

В работе рассматриваются основное состояние и свойства скирмионов в магнитоэлектрических пленках, а именно, в антиферромагнитных/сегнетоэлектрических сверхрешетках с помощью адаптированного метода наискорейшего спуска и Монте-Карло моделирования. Исследовано влияние магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля на конфигурации основного состояния и упорядочение во взаимодействующих слоях со структурой простой кубической решетки с фрустрированной классической моделью Гейзенберга в одном слое и Изинга в другом.

DOI: 10.31857/S1234567821210060

В настоящее время топологические спиновые структуры, а именно, наноразмерные спиновые вихри – в силу своих топологических свойств и чрезвычайно малых размеров рассматриваются в качестве потенциальных носителей информаций в области спинтроники и новых типах вычислительных устройств [1–3]. Спиновые нанообъекты – скирмионы, получили свое название в честь физика Тони Скайрма, построившего топологическую конфигурацию четырехмерного векторного поля в координатах пространства (3) – времени (1) [4]. Объекты, подобные скирмионам в спиновом пространстве, привлекли большое внимание исследователей в области физики конденсированного состояния – а именно, скирмионы были предложены для объяснения квантового эффекта Холла [5–7]. Кроме того, эти объекты совсем недавно, экспериментально обнаружены в магнитных мультислоях [8–10] и объемных магнитных материалах [11–14]. В конденсированных средах впервые было предсказано, что решетка скирмионов может формироваться во вращающемся сверхтекучем 3He, см. [15]. Позже это было экспериментально обнаружено во вращающемся криостате, см. [16]. Динамика скирмионов использовалась для наблюдения аналога киральной аномалии в конденсированных средах [17, 18]. Скирмионы относятся к топологическим спиновым вихревым состояниям, как и вихревые магнитные наноточки, которые, как правило, формируются под влиянием фрустраций, а также внешнего магнитного поля в нецентросимметричных нанопленках или на интерфейсах в гетероструктурах и бислоях [19–21]. Курумаджи [22] экспериментально обнаружил появление фазы решетки скирмионов блоховского типа в фрустрированном центросимметричном магнетике Gd_2PdSi_3 с треугольной решеткой. Установлено, что фрустрации в магнитных взаимодействиях способствуют возникновению скирмионов [23] и стабилизируют скирмионную фазу во внешнем магнитном поле, что подтверждается экспериментами. Таким образом, решетка скирмионов может быть стабилизирована конкурирующими взаимодействиями в магнитных пленках с треугольной решеткой, но тем не менее остается еще много неизученных физических свойств скирмионных решеток в пленках с фрустрированной магнитной системой. Следует отметить, что конуренция обменных взаимодействий и межфазной связи типа взаимодействия Дзялошинского–Мория, которое имеет место в сверхтонких гетероструктурах [12, 13, 24] допускает формирование скирмионов, устойчивых даже при комнатных температурах, что ведет к возможности использования магнитоэлектрических бислойных материалов и сверхрешеток в наноэлектронике. В настоящее время предложено несколько методов получения стабильных скирмионов в некиральных магнитных пленках и бислоях [25, 26]. В работе [27] установлено, что в магнитных пленках на столбчатых дефектах определенного типа могут образовываться вихревые неоднородности. В гетероструктурах, со-

1) e-mail: sharafullinif@yandex.ru
2) H. T. Diep.

стоящих из ферромагнитных пленок и сегнетоэлектрического изолятора также могут формироваться при комнатных температурах устойчивые магнитные скирмионы и вихри, поэтому такие материалы являются перспективными для устройств спинтроники нового поколения [28–30], таких как, например, микромагнитный скирмионный транзистор для скирмионно-электронной памяти. Отметим, что в работе [31] мы исследовали влияние магнитоэлектрического взаимодействия вида Дзялошинского–Мория в сверхрешетке ферромагнетик/сегнетоэлектрик в отсутствии фрустраций. В отсутсвии внешнего магнитного поля показано, что спиновая конфигурация основного состояния является периодически неколлинеарной. В работе [32] исследовалось упорядочение и спиральные структуры для классической модели Гейзенберга на треугольной решетке с учетом фрустраций в магнитных пленках. В предложенной работе мы покажем, что в фрустрированных системах скирмионные решетки на магнитоэлектрических интерфейсах более устойчивы к полевым воздействиям. Рассмотрим модель и определим спиновую конфигурацию основного состояния бислоя антиферромагнетик/ферроэлектрик в зависимости от величин магнитоэлектрических взаимодействий и напряженностей внешнего магнитного поля. Двуслойная магнитоэлектрическая пленка – или бислой, рассматриваемый в настоящей работе, состоит из антиферромагнитной и ферроэлектрической пленки. Гамильтониан рассматриваемой системы выберем в следующем виде:

$$H_m = -\sum_{i,j} J_{ij}^m \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i,k} J_{ik}^{2m} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k - \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i -$$

$$- \sum_{i,j} J_{ij}^f \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_j - \sum_{i,j,k} J_{i,j}^{mf} e_{i,j} \mathbf{P_k} \cdot [\mathbf{S_i} \times \mathbf{S_j}], \qquad (1)$$

где $\mathbf{S}_i$ – это спин i-го узла простой кубической решетки, $\mathbf{H}$ – напряженность внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости пленки вдоль оси z, $J_{ij}^m < 0$ – антиферромагнитное взаимодействие ближайших спинов $\mathbf{S}_i$ и $\mathbf{S}_j$, $J_{ik}^{2m} < 0$ – обменное взаимодействие двух спинов, следующих за ближайшими соседними, $\mathbf{P}_i$ – поляризация i-го узла простой кубической решетки ферроэлектрической пленки, $J_{ij}^f > 0$ – параметр обменного взаимодействия между поляризациями на ближайших узлах i и j в плоскости ферроэлектрического слоя. Оригинальным в гамильтониане является последнее слагаемое, описывающее взаимодействие между спинами и поляризациями ближайших слоев – магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе антиферромагнитной и сегнетоэлектрической пленок. Отметим, что в исследуемом случае вектор поляризации во всех узлах направлен перпендикулярно плоскости пленок, а энергия магнитоэлектрического взаимодействия будет стремится к минимально возможному значению, если вектора спинов антиферромагнитной пленки лежат в xy-плоскости ($S^z = 0$). Антиферромагнитное обменное взаимодействие между ближайшими и следующими за ближайшими спинами конкурирует с магнитоэлектрической связью на интерфейсе вида $\mathbf{P_k} \cdot [\mathbf{S_i} \times \mathbf{S_j}]$. Численные расчеты подтверждают, что в зависимости от соотношения величин взаимодействий на межфазной границе возникают различные конфигурации основного состояния, при этом некоторые из них являются стабильными в широких диапазонах внешнего магнитного поля и температур. В случае учета фрустрации основное состояние определяется с помощью адаптированного нами метода наискорейшего спуска. Метод состоит в минимизации энергии спинов путем выравнивания каждого спина по направлению локального поля, действующего на каждый спин со стороны его окружения. Процедуру минимизации выполняем следующим образом: генерируется случайная начальная спиновая конфигурация. Далее выбирается один спин и вычисляется поле, действующее на него со стороны ближайших соседей и соседей, следующих за ближайшими. Далее мы присваиваем рассматриваемому спину или поляризации на узле направление вычисленного результирующего поля взаимодействия и затем переходим к рассмотрению следующего узла, для которого выполняется аналогичная процедура. Перебираем таким образом все узлы в системе и повторяем эту процедуру до тех пор, пока общая энергия не достигнет минимума. Таким образом выполняется большое число итераций с различными начальными конфигурациями и исследована временная зависимость энергии. Установлено, что достигнутая в результате выполнения минимизации энергия основного состояния с большой степенью точности совпадает для различных начальных конфигураций. Это также находит подтверждение вычисленными значениями среднего значения энергии с помощью моделирования Монте-Карло: вычисленное значение энергии при низких температурах стремится к значению, определенному с помощью метода наискорейшего спуска. Это говорит о корректном определении конфигурации основного состояния. В работе рассматривается бислой с линейными размерами $N \times N \times L$, $N = 40$ и $L = L_m + L_f = 2$. На систему накладываются периодические граничные условия в плоскости пленок. Значения обменных параметров для взаимодействующих ближайших соседей приняты следующими: $J^m = -1$, $J^f = 1$. Спиновая конфигурация основного состояния для малых величин магнитоэлектрического взаимодействия в интервале $J^{mf} \in (-0.5, 0)$ состоит из антиферромагнитных и неколлинеарных доменов. При возрастании параметра межфазной магнитоэлектрической связи в основном состоянии стабилизируется неколлинеарная периодическая структура. На рисунках 1, 2

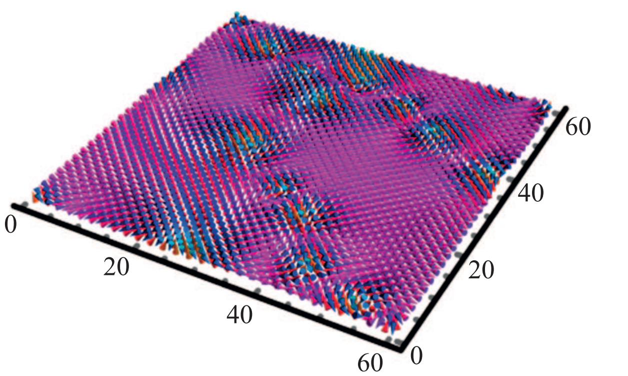

Рис. 1. (Цветной онлайн) Структура спиновой конфигурации в основном состоянии антиферромагнитного слоя для $H = 0$ с $J^m = -1, J^f = 1$, $J^{2m} = -0.3$ $J^{mf} = -1.35$

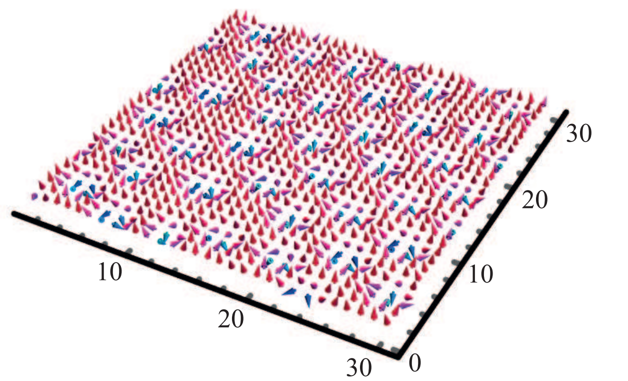

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спиновая конфигурация основного состояния антиферромагнитного слоя для $H = 1.25$ и $J^m = -1, J^f = 1$, $J^{2m} = -0.3$, $J^{mf} = -1.25$

показаны некоторые примеры, из которых можно видеть формирование скирмионов различного диаметра на антиферромагнитной пленке. Это наблюдается в диапазоне значений $J^{mf} \in (-1.05, -0.5)$, $J^{2m} \in (-0.4, -0.25)$. На рисунке 1 изображен случай $J^{mf} = -1.35$, который демонстрирует начало зарождения большого числа скирмионов на интерфейсе.

Результаты выполненных численных расчетов конфигурации основного состояния позволяют сделать вывод о том, что в фрустрированном (а именно, $J^{2m} \in (-0.4, -0.25)$) бислое антиферромагнетик/ферроэлектрик с простой кубической решеткой скирмионы и магнитные вихри могут формироваться в диапазоне значений магнитоэлектрического взаимодействия $J^{mf} \in (-1.35, -0.5)$ даже в отсутствии воздействия внешнего магнитного поля (рис. 1b). При включении внешнего магнитного поля наблюдается интересный эффект: в диапазоне значений магнитоэлектрического взаимодействия $J^{mf} \in (-1.35, -0.95)$ и обменного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими $J^{2m} \in (-0.4, -0.25)$, в спиновой конфигурации основного состояния для значений напряженности приложенного магнитного поля $H \in (0.1, 0.5)$ происходит разрушение скирмионной структуры. Но при увеличении напряженности внешнего магнитного поля до значений, сравнимых с параметром магнитоэлектрического взаимодействия, мы видим формирование упорядоченной решетки скирмионов (см. рис. 2).

Такой тип спиновой конфигурации основного состояния абсолютно идентичен для $J^{2m} = -0.4$, при таких же значениях для параметров $J^m = -1$, $J^f = 1$, $J^{mf} \in (-1.55, -1.15)$ и $H = 1.25$. При возрастании магнитоэлектрической связи устойчивость скирмионов по отношению к приложенному магнитному полю увеличивается. Для Монте-Карло моделирования поведения различных физических величин в зависимости от температуры T и размеров системы, в работе использовался алгоритм Метрополиса для бислоя с кубической решеткой и линейными размерами $N \times N \times 2$. При моделировании для заданных значений параметров системы мы задаем в качестве начальных условий те конфигурации основного состояния векторов спина и поляризации на узлах, которые были определены адаптированным методом наискорейшего спуска. Анализировались температурные зависимости следующих физических величин – средние значения магнитного параметра порядка слоя (P_m), энергия и теплоемкость бислоя. Параметр порядка антиферромагнитной пленки определяется как проекция значения спина на узле при данной температуре и в данный момент времени $\mathbf{S}_i(T,t)$ на его же значение в основном состоянии при $T = 0$, полученное методом наискорейшего спуска. После этого выполняется процедура усреднения по времени. Таким образом, параметр порядка антиферромагнитного слоя определяется выражением:

$$P_m = \frac{1}{N^2(t_a - t_0)} \sum_{i \in n} \left| \sum_{t=t_0}^{t_a} \mathbf{S}_i(T,t) \cdot \mathbf{S}_i^0(T=0) \right|,$$

где $\mathbf{S}_i(T,t)$ – это спин на i-м узле в момент времени t при температуре T, $\mathbf{S}_i(T = 0)$ – его значение в основном состоянии при $T = 0$, $\langle ... \rangle$ – статистическое среднее. На рисунке 3 показана зависимость теплоемкости и параметра порядка антиферромагнитного слоя от температуры для $J^{mf} = -1.25$, $H = 1.25$, $J^m = -1.0$, $J^f = 1.0$, $J^{2m} = -0.3$. При этих значениях параметров формируется решетка скирмионов в основном состоянии в фрустрированной антиферромагнитной пленке.

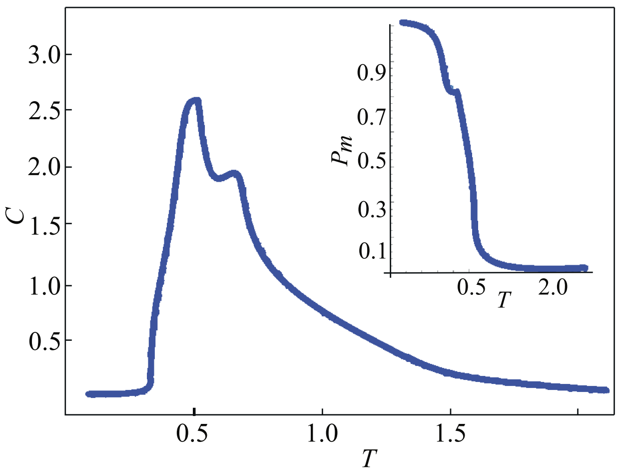

Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость теплоемкости антиферромагнитной пленки и параметра порядка (вставка) для набора параметров: $J^{mf} = -1.25$, $H = 1.25$, $J^m = -1.0$, $J^f = -1.0$, $J^{2m} = -0.3$

Приведенные рисунки позволяют сделать выводы о том, что графики зависимости от температуры у теплоемкости и параметра порядка антиферромагнитной пленки не содержат областей метастабильности при низких T, что связано с правильным выбором основного состояния спиновой конфигурации для выполнения Монте-Карло моделирования. Следует отметить, что антиферромагнитный слой подвержен двум переходам, один из которых обусловлен разрушением скирмионной структуры, а второй пик на графиках соответствует переходу от упорядоченного состояния к неупорядоченному. Оба перехода происходят при различных температурах $T_{sc} = 0.52$ и $T_{od} = 0.67$ соответственно. Первый переход, связанный с разрушением вихревых состояний, происходит при более низкой температуре, чем магнитный переход. Это очень важный момент, поскольку со стабильностью решетки скирмионов и отдельных скирмионов связано практическое использование этих нанообъектов. Результаты моделирования показывают, что скирмионная фаза устойчива до температур, сравнимых с температурой перехода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу. Показано, что решетка скирмионов устойчива вплоть до температур, сравнимых с критическими температурами, при которых происходят переходы в парамагнитную фазу.

И. Ф. Шарафуллин благодарит за финансовую поддержку в ходе данной работы государственное задание на выполнение научных исследований лабораториями (приказ MN-8/1356 от 20.09.2021).

1. A.Rosch, Nat. Nanotechnol. **12**, 103 (2017).
2. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotechnol. **8**, 152 (2013).
3. W. Koshibae, Y. Kaneko, J. Iwasaki, M. Kawasaki, Y. Tokura, and N. Nagaosa, Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 053001 (2015).
4. T. H. R. Skyrme, Proc. R. Soc. A **247**, 260 (1958).
5. M. Stone, Phys. Rev. B **53**, 16573 (1996).
6. A. H. MacDonald and J. J. Palacios, Phys. Rev. B. **58**, 10171 (1998).
7. H. A. Fertig, Int. J. Mod. Phys. B **13**, 461 (1999).
8. A. N. Bogdanov and U. K. Rössler, Phys. Rev. Lett. **87**, 037203 (2001).
9. A. N. Bogdanov and A. Hubert, J. Magn. Magn. Mater. **138**, 255 (1994).
10. A. Abanov and V. L. Pokrovsky, Phys. Rev. B **58**, R8889 (1998).
11. W. Jiang, P. Upadhyaya, W. Zhang, G. Yu, M. B. Jungfleisch, F. Y. Fradin, J. E. Pearson, Y. Tserkovnyak, K. L. Wang, O. Heinonen, S. G. E. te Velthuis, and A. Hoffmann, Science, **349**, 283 (2015).
12. C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N.Reyren et al. (Collaboration), Nat. Nanotechnol. **11**, 444 (2016).
13. S. Woo, K. Litzius, B. Krüger et al. (Collaboration), Nat. Mater. **15**, 501 (2016).
14. O. Boulle, J. Vogel, H. Yang et al. (Collaboration), Nat. Nanotechnol. **11**, 449 (2016).
15. G. E. Volovik and N. B. Kopnin, Pis'ma v ZhETF **25**, 26 (1977). [G. E. Volovik and N. B. Kopnin, JETP Lett. **25**, 22 (1977)].
16. M. M. Salomaa and G. E. Volovik, Rev. Mod. Phys. **59**, 533 (1987).
17. T. D. C. Bevan, A. J. Manninen, J. B. Cook, J. R. Hook, H. E. Hall, T. Vachaspati, and G. E. Volovik, Nature. **386**, 689 (1997).
18. G. E. Volovik, JETP Lett. **103**, 140 (2016).
19. A. B. Butenko, A. A. Leonov, U. K. Rössler, and A. N. Bogdanov, Phys. Rev. B **82**, 052403 (2010).
20. S. E. Hog, A. Bailly-Reyre, and H. T. Diep, J. Magn. Magn. Mater. **455**, 32 (2018).
21. U. K. Rössler, A. A. Leinov, and A. N. Bogdanov, J. Phys. Conf. Ser. **303**, 012105 (2011).
22. T. Kurumaji, T. Nakajima, M. Hirschberger, A. Kikkawa, Y. Yamasaki, H. Sagayama, H. Nakao, Y. Taguchi, T. Arima, and Y. Tokura, Science **365**, 914 (2019).
23. T. Okubo, S. Chunghi, and H. Kawamura, Phys. Rev. Lett. **108**, 017206 (2012).

24. F. Büttner, C. Moutafis, M. Schneider et al. (Collaboration), Nat. Phys. **11**, 225 (2015).
25. L. Sun, R. X. Cao, B. F. Miao, Z. Feng, B. You, D. Wu, W. Zhang, A. Hu, and H. F. Ding, Phys. Rev. Lett. **110**, 167201 (2013).
26. M. V. Sapozhnikov, J. Magn. Magn. Mater. **396**, 338 (2015).
27. R. M. Vakhitov, R. V. Solonetsky, and A. A. Akhmetova, J. Appl. Phys. **128**, 153904 (2020).
28. H. Pei, S. Guo, L. Ren, C. Chen, B. Luo, X. Dong, K. Jin, R. Ren, and H. F. Zeeshan, Sci. Rep. **7**, 1 (2017).
29. S. E. Hog, F. Kato, H. Koibuchi, and H. T. Diep, J. Magn. Magn. Mater. **498**, 166095 (2020).
30. A. P. Pyatakov, Phys. B: Cond. Mat. **542**, 59 (2018).
31. I. F. Sharafullin, M. K. Kharrasov, and H. T. Diep, Phys. Rev. B **99**, 214420 (2019).
32. A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, Nat. Mater. **14**, 871 (2015).