

Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет
Кафедра статистической физики



**ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В СИСТЕМАХ
АТОМНОГО МАСШТАБА ПРИ КОНЕЧНЫХ
ТЕМПЕРАТУРАХ**

Бакалаврская работа студента
дневного отделения

_____ **Иванова Алексей Владимировича**

Научный руководитель:

_____ д.ф.-м.н., проф. **Уздин В.М.**

Рецензент:

_____ к.ф.-м.н. **Бессараб П.Ф.**

Санкт-Петербург

2014

Содержание

1	Введение.	2
2	Спин-поляризованный ток. Теория Слончевского.	3
3	Магнитные переходы под воздействием спинного тока при конечной температуре. Модель и численный расчёт.	6
3.1	Термоиндуцированные магнитные переходы.	6
3.2	Магнитные переходы при конечной температуре под воздействием спинного тока.	11
3.2.1	Эквивалентность уравнений Ландау-Лифшица и Ландау-Лифшица-Гильберта	11
3.2.2	Численное моделирование	11
3.3	Переход к каноническому уравнению Ландау-Лифшица. .	14
4	Заключение	15

1 Введение.

Ферромагнитные материалы при температурах ниже температуры Кюри обладают спонтанной намагниченностью. Их используют в качестве носителей информации. Сегодня такие носители достигают размеров наномасштаба и при конечных температурах возможны активационные переходы между разными магнитными состояниями, которые необходимо контролировать для создания элементов памяти. Магнитными переходами можно управлять внешним магнитным полем. Это требует введение контуров токов, которые создают внешнее поле. Однако в последнее время был предложен другой подход, который предполагает движение магнитных доменов под воздействием спин-поляризованного тока, протекающего по тому же образцу в котором находятся магнитные домены, ответственные за запись информации.

Одной из основных характеристик в процессах перемагничивания является константа скорости переходов, т.е. число переходов между магнитными состояниями в единицу времени. Время жизни магнитного состояния во много раз больше, чем время осцилляций магнитных моментов вблизи положения равновесия и переход из одного устойчивого состояния в другое - редкое событие. Поэтому расчет константы скорости для структур с большим числом степеней свободы из прямого моделирования динамики при низких температурах невозможен. Однако, для систем с малым числом степеней свободы, например, для одного классического спина, такой расчет сделать можно.

В данной работе прямым моделированием динамики исследовано воздействие спин-поляризованного тока на процесс перемагничивания такой системы, состоящей из магнитного момента при конечной температуре в поле анизотропии "легкая ось" и "легкая плоскость".

2 Спин-поляризованный ток. Теория Слончевского.

В этом разделе будет рассказано о воздействии спин-поляризованного тока на намагниченность ферромагнитного образца. Более подробное описание представлено в статьях [1] - [3].

При пропускании через тонкий слой ферромагнетика спин-поляризованного тока происходит передача углового момента от электронного тока к образцу. Для того, чтобы понять это явление рассмотрим рассеяние одного электрона на слое ферромагнетика. Пусть намагниченность ферромагнетика направлена вдоль оси Z , а электрон находится в состоянии с проекцией спина вдоль оси \mathbf{e}_p , составляющей угол θ по отношению к оси Z Рис.1.

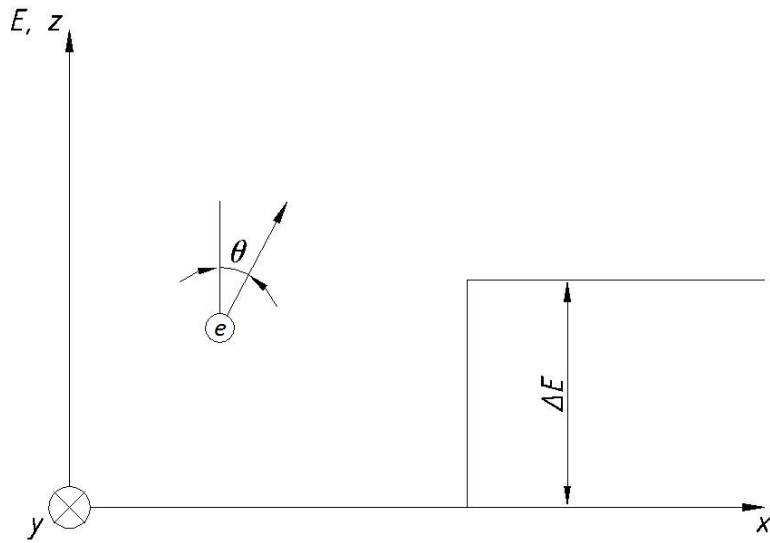


Рис. 1:

Модельная задача для рассеяния электрона на слое ферромагнетика.

Состояние электрона с проекцией спина вдоль оси \mathbf{e}_p , можно представить, как суперпозицию двух состояний - с проекцией спина вдоль оси Z и против. Действительно, легко убедиться, что собственный вектор оператора $\hat{S}_p = (\hat{S}, \mathbf{e}_p)$ с собственным значением $1/2$ есть :

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle_p = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \quad (1)$$

Тогда волновую функция падающего электрона можно записать через суперпозицию волновых функций с проекцией спина вдоль оси Z и против:

$$\Psi_{in} = \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}, \quad (2)$$

где

$$\Psi_{\uparrow} = e^{i(q,R)} e^{ik_x x} \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle \quad (3)$$

$$\Psi_{\downarrow} = e^{i(q,R)} e^{ik_x x} \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \quad (4)$$

Далее, решая уравнение Шредингера для каждой компоненты отдельно и используя условия сшивания на границе можно найти прошедшую и отраженную волновую функцию. При этом нужно учесть, что вне ферромагнетика волновой вектор не зависит от проекции спина, а внутри ферромагнетика волновой вектор будет разным для разных проекций спина [1] - [2]:

$$\Psi_{tr} = e^{i(q,R)} e^{ik_x^{\uparrow} x} \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i(q,R)} e^{ik_x^{\downarrow} x} \frac{2k_x}{k_x + k_x^{\downarrow}} \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \quad (5)$$

$$\Psi_{re} = e^{i(q,R)} e^{-ik_x x} \frac{k_x - k_x^{\downarrow}}{k_x + k_x^{\downarrow}} \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \quad (6)$$

Далее, рассчитаем плотность спинового тока [2]:

$$\mathbf{j} = \text{Re}(\Psi^* \hat{S} \otimes \hat{v} \Psi) \quad (7)$$

где \hat{S} - оператор спина, \hat{v} -оператор скорости.

$$\mathbf{j}_{in} = \frac{\hbar^2 k_x}{2m} (\sin \theta \mathbf{e}_x + \cos \theta \mathbf{e}_z), \quad (8)$$

$$\mathbf{j}_{re} = \frac{\hbar^2 k_x}{2m} \left(\frac{k_x - k_x^{\downarrow}}{k_x + k_x^{\downarrow}} \sin \frac{\theta}{2} \right)^2 \mathbf{e}_z, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{tr} = \frac{\hbar^2 k_x}{2m} & (\sin \theta \cos[(k_x^{\uparrow} - k_x^{\downarrow})x] \mathbf{e}_x - \sin \theta \sin[(k_x^{\uparrow} - k_x^{\downarrow})x] \mathbf{e}_y \\ & + \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \frac{4k_x k_x^{\downarrow}}{(k_x + k_x^{\downarrow})^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \mathbf{e}_z) \end{aligned} \quad (10)$$

Т.к. плотность падающего спинового тока, не равна сумме отраженного и прошедшего, то угловой момент не сохраняется. Значит, он передается ферромагнитному образцу. Поэтому, на магнитные моменты в ферромагнетике действует момент сил [2]:

$$\mathbf{\Gamma} = A(\mathbf{j}_{in} + \mathbf{j}_{re} - \mathbf{j}_{tr}) \quad (11)$$

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{A\hbar^2 k_x}{2m} \sin \theta \mathbf{e}_x - \frac{A\hbar^2 k}{2m} \sin \theta (\cos[(k_x^\uparrow - k_x^\downarrow)x] \mathbf{e}_x + \sin[(k_x^\uparrow - k_x^\downarrow)x] \mathbf{e}_y) \quad (12)$$

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}_{sl} - \frac{A\hbar^2 k}{2m} \sin \theta \mathbf{\Gamma}_{fl} \quad (13)$$

$$\mathbf{\Gamma}_{sl} = \frac{A\hbar^2 k_x}{2m} \sin \theta \mathbf{e}_x = \frac{A\hbar^2 k_x}{2mM^2} [\mathbf{M}, [\mathbf{M}, \mathbf{e}_p]] \quad (14)$$

$$\mathbf{\Gamma}_{fl} = \cos[(k_x^\uparrow - k_x^\downarrow)x] \mathbf{e}_x + \sin[(k_x^\uparrow - k_x^\downarrow)x] \mathbf{e}_y \quad (15)$$

Слагаемое $\mathbf{\Gamma}_{sl}$ было впервые введено Слончевским, соответствующий вклад носит его имя (член Слончевского) [3]. Если провести более строгий расчет [2], то член Слончевского имеет вид:

$$\mathbf{\Gamma}_{sl} = -\frac{\hbar\gamma g(P, \eta)I}{2eM^2} [\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{n}], \quad (16)$$

где e - заряд электрона, γ - гиромагнитное отношение, $P = \frac{|I_\uparrow - I_\downarrow|}{|I_\uparrow + I_\downarrow|}$ - спиновая поляризации, $g(P, \phi)$ - некоторая функция, зависящая от спиновой поляризации и от угла между осями поляризации тока и намагниченности образца. Вид функции $g(P, \phi)$ зависит от модели задачи, далее мы будем использовать феноменологическую теорию, когда $g(P, \phi) = P$.

Слагаемое $\mathbf{\Gamma}_{fl}$ приводит только к прецессии вокруг оси Z , как при постоянном магнитном поле. Оказывается, что $\mathbf{\Gamma}_{fl}$, благодаря быстрым осцилляциям в k -пространстве, во много раз меньше члена Слончевского, поэтому в расчетах им, как правило, пренебрегают [2].

3 Магнитные переходы под воздействием спинного тока при конечной температуре. Модель и численный расчёт.

3.1 Термоиндуцированные магнитные переходы.

Динамика магнитного момента описывается уравнением Ландау-Лифшица

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R})] + \mathbf{\Gamma}_{diss}, \quad (17)$$

где $\mathbf{\Gamma}_{diss}$ - трение в форме Ландау-Лифшица:

$$\mathbf{\Gamma}_{diss} \equiv \mathbf{\Gamma}_{LL} = -\gamma \frac{\alpha}{M} [\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R}]], \quad (18)$$

либо в форме Гильберта:

$$\mathbf{\Gamma}_{diss} \equiv \mathbf{\Gamma}_{LLG} = \frac{\alpha}{M} [\mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}], \quad (19)$$

\mathbf{H}_{eff} - эффективное поле:

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}}$$

В уравнениях (17)-(18) \mathbf{R} -случайное поле, которое будем считать распределенным по Гауссову закону. В простейшем случае δ -коррелированного процесса коррелятор случайных полей задается выражением [4] :

$$\langle \mathbf{R}_k(t_i) \mathbf{R}_l(t_j) \rangle = 2D \delta_{kl} \delta(t_i - t_j) \quad (20)$$

$$D_{LL} = \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \frac{k_b T}{\gamma M}$$

$$D_{LLG} = \alpha \frac{k_b T}{\gamma M}$$

Оказывается, что уравнение в форме Ландау-Лифшица (ЛЛ) отличается от уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ), только перенормировкой параметров

$$\gamma \rightarrow \gamma / (1 + \alpha^2).$$

Отметим, что уравнение ЛЛГ содержит более старшие члены по α . В реальных экспериментах $\alpha \sim 0.01 \div 0.1$.

Рассмотрим один магнитный момент в поле анизотропии "легкая ось" и "легкая плоскость". Выражение для энергии такой системы имеет вид:

$$E_a = k_1 (\mathbf{M}, \mathbf{e}_1)^2 + k_2 (\mathbf{M}, \mathbf{e}_2)^2 \quad (21)$$

$$k_1 < 0$$

$$k_2 > 0$$

Энергетическая поверхность системы представлена на Рис. 2 как функция углов θ и ϕ , задающих направление магнитного момента. Предполагаются периодические условия как по углу θ , так и по углу ϕ . Энергия имеет две седловые точки и два минимума. Система может находиться в двух устойчивых состояниях. Величина барьера равна разности энергии в седловой точке и в точке минимума.



а) Зависимость энергии от фазовых переменных

б) Линии уровня

Рис. 2: Энергетическая поверхность. $\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_z, k_1 = -5, k_2 = 7$

Эффективное поле \mathbf{H}_{eff} определяется выражением:

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}} = -2k_1(\mathbf{e}_1, \mathbf{M})\mathbf{e}_1 - 2k_2(\mathbf{e}_2, \mathbf{M})\mathbf{e}_2$$

При конечной температуре система совершает переходы из одного устойчивого состояния в другое (Рис.3).

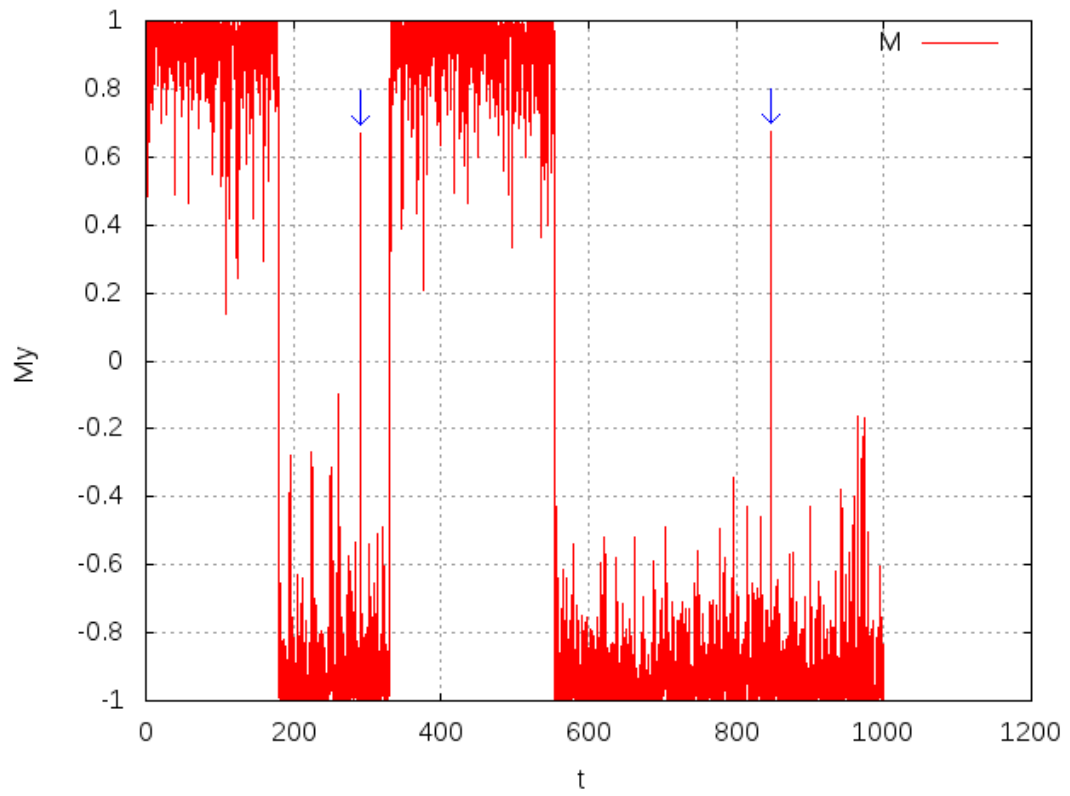


Рис. 3: Динамика проекции магнитного момента на легкую ось анизотропии. Синей стрелкой указаны ложные переходы. $T = 0.82, k_1 = -5, k_2 = 7$

Нас будет интересовать константа скорости перехода между состояниями. При этом нужно выбросить "ложные" переходы, когда система совершает скачок из одного состояния в другое, но при этом не успев термализоваться совершает обратный переход. С этой целью, вводится дополнительный параметр - энергия отсечения E_{cut} , который позволяет отделять истинные переходы от ложных: если система совершила переход из одного состояния в другое и при этом её энергия стала меньше, чем E_{cut} , то такой переход будем считать истинным. Для корректного определения энергии отсечения строилась зависимость константы скорости от E_{cut} . Из Рис.4 видно, что константа скорости имеет плато. Будем считать, что ему и соответствуют истинные переходы. Из теории переходного состояния [5] известно, что константа скорости зависит от температуры по экспоненциальному закону (Закон Аррениуса):

$$k = a \exp\left(-\frac{E_b}{k_B T}\right), \quad (22)$$

Причем, как было показано в статье [5], в гармоническом приближении предэкспоненциальный множитель зависит от собственных чисел матрицы вторых производных от энергии в точке минимума и в седловой точке, а величина E_b равна разности значений энергии в седловой точке и в точке минимума.

Закон (22) был получен для данной системы в результате численного моделирования Рис.5.

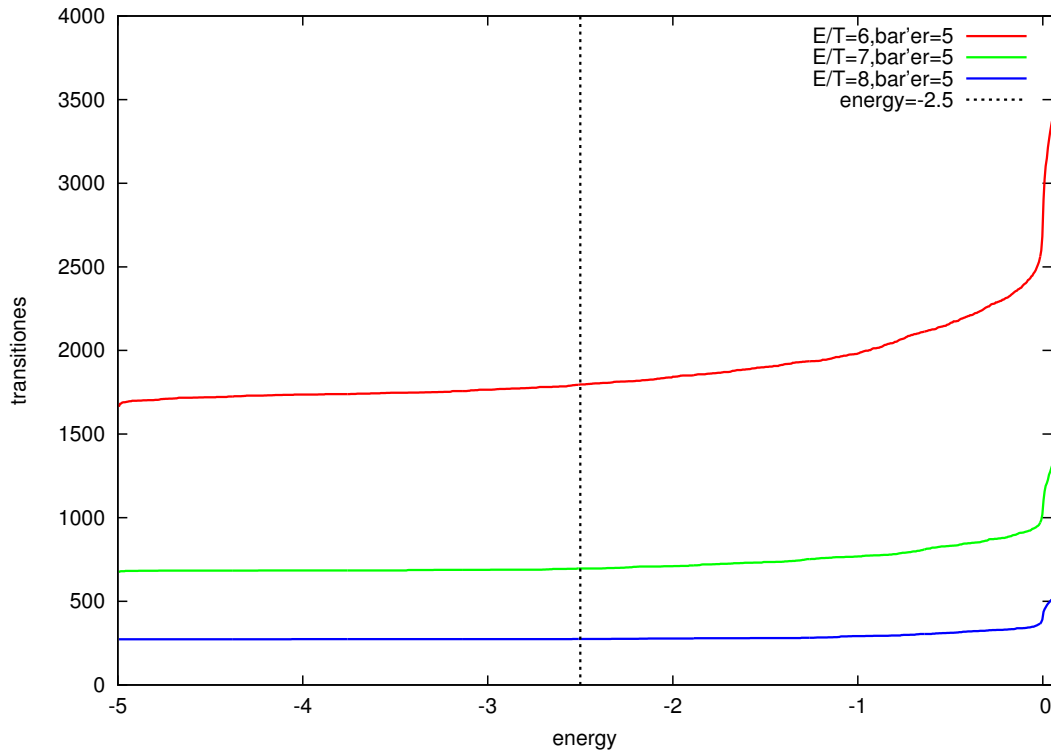


Рис. 4: Зависимость числа переходов от энергии отсечения при разных значениях температуры. Пунктирной линией отмечена энергия отсечения, которая использовалась при моделировании. $\alpha = 0.2$, $k_1 = -5$, $k_2 = 7$

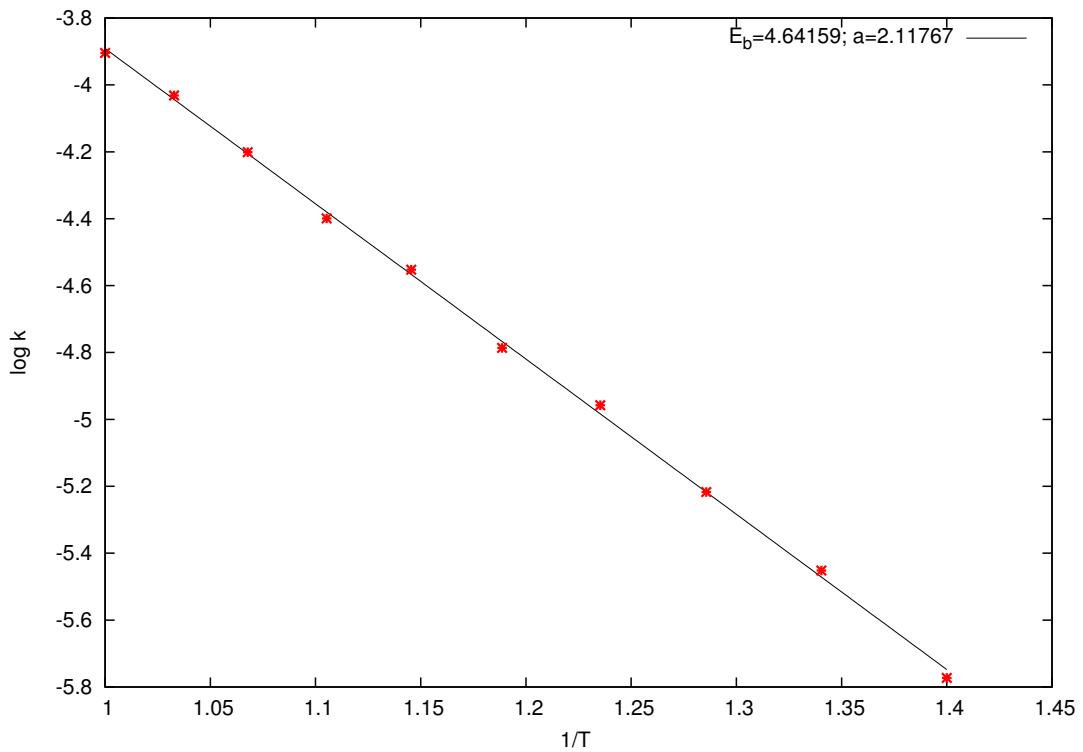


Рис. 5: Зависимость логарифма константы скорости от обратной температуры. Линейная зависимость означает, что справедлив закон Аррениуса. $\alpha = 0.2$, $k_1 = -5$, $k_2 = 7$

3.2 Магнитные переходы при конечной температуре под воздействием спинового тока.

3.2.1 Эквивалентность уравнений Ландау-Лифшица и Ландау-Лифшица-Гильберта

Для того, чтобы учесть воздействие спинового тока к уравнению Ландау-Лифшица (17) добавляется член Слончевского (16):

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R})] + \Gamma_{diss} - \frac{1}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{I}]], \quad (23)$$

$$\mathbf{I} \equiv \frac{\hbar\gamma PI}{2eM} \mathbf{n}.$$

Запишем диссипационный член в форме Гильберта:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R})] + \frac{\alpha}{M}[\mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}] - \frac{1}{M^2}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{I}]], \quad (24)$$

и подставим рекуррентно уравнение в само себя:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1 + \alpha^2}[\mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R} - \alpha \mathbf{I})] - \frac{\gamma}{1 + \alpha^2}[\frac{\mathbf{M}}{M} \times [\mathbf{M} \times \alpha(\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R}) + \mathbf{I}]] \quad (25)$$

Если значение тока и трение малы, то можно пренебречь слагаемым:

$$\frac{\gamma}{1 + \alpha^2}[\mathbf{M} \times \alpha \mathbf{I}] \quad (26)$$

Тогда уравнение (24) примет вид:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1 + \alpha^2}[\mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R})] - \frac{\gamma}{1 + \alpha^2}[\frac{\mathbf{M}}{M} \times [\mathbf{M} \times \alpha(\mathbf{H}_{eff} + \mathbf{R}) + \mathbf{I}]], \quad (27)$$

Последнее совпадает с уравнением Ландау-Лифшица с перенормированным параметром:

$$\gamma \rightarrow \gamma/(1 + \alpha^2).$$

Это, в свою очередь, означает эквивалентность уравнений (24) и (27) при малых значениях тока и трения.

3.2.2 Численное моделирование

Рассмотрим динамику одного магнитного момента в поле анизотропии "легкая ось" и "легкая плоскость" при конечной температуре под воздействием спинового тока. Направим легкую ось вдоль оси X . Легкая плоскость XZ . Пусть ток поляризован вдоль оси X . Тогда система будет по-прежнему иметь два устойчивых состояния, как и при нулевом токе, но теперь время жизни в каждом из состояний различны. Нас будет интересовать

зависимость константы скорости как от температуры, так от величины тока. Ясно, что при нулевом токе ответ для константы скорости должен совпадать с результатами из раздела 3.1. Поэтому зависимость константы скорости искалась в виде:

$$\log k(I, T) = \log k(I = 0, T) + f(T) \cdot I \quad (28)$$

При численном моделировании считалось число переходов из одного состояния в другое в единицу времени. Строилась зависимость логарифма константы скорости от значения тока при разных значениях температуры. Из Рис.6 видно, что зависимость линейная.

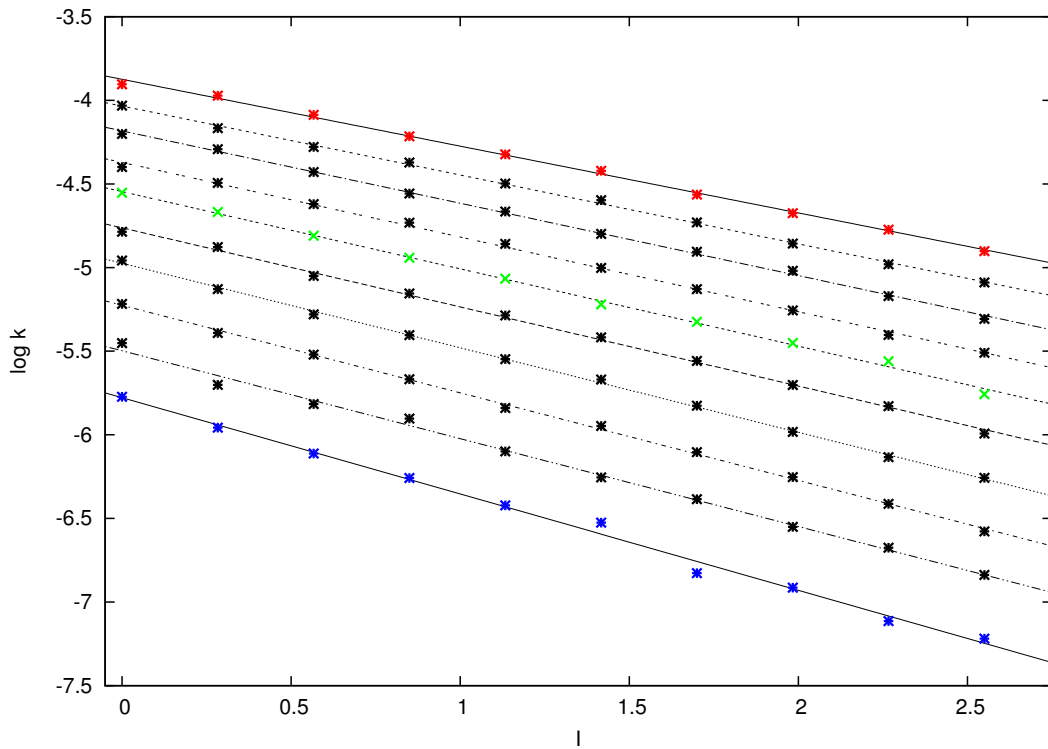


Рис. 6: Зависимость логарифма константы скорости от величины тока при разных значениях температуры. Линейная зависимость согласуется с формулой (28). $\alpha = 0.2$, $k_1 = -5$, $k_2 = 7$

После аппроксимации, строилась зависимость полученных значений $\log k(I = 0, T)$, $f(T)$ от обратной температуры Рис.7-8.

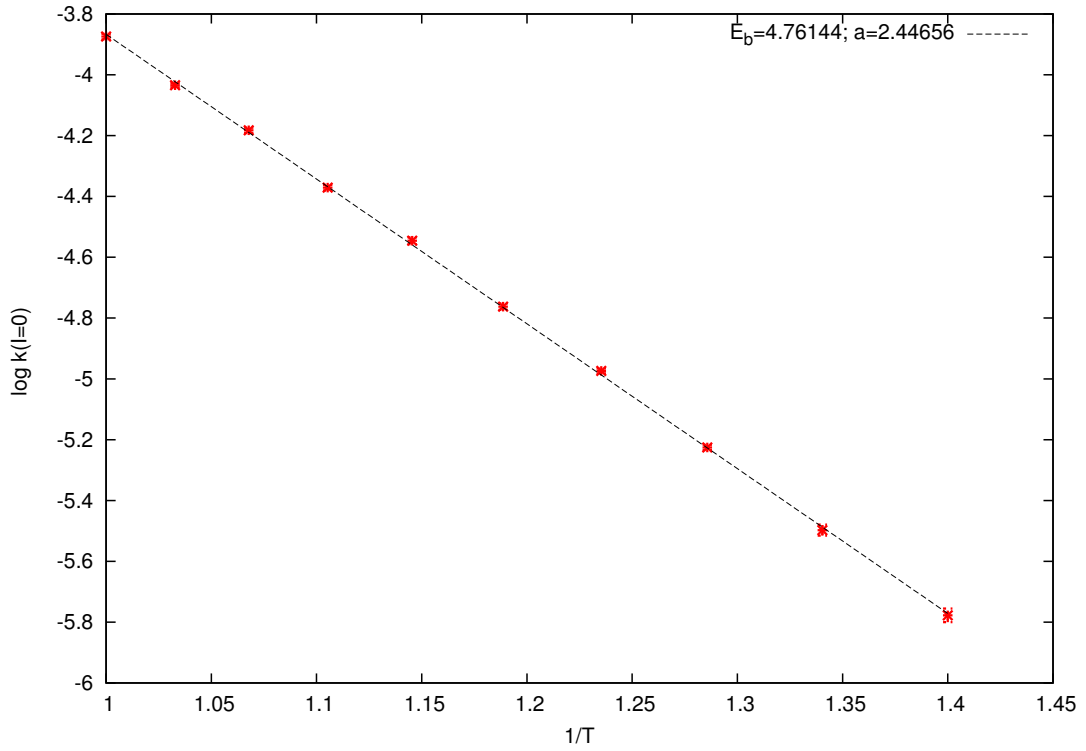


Рис. 7: Зависимость логарифма константы скорости при нулевом токе от температуры, полученная в результате аппроксимации. $\alpha = 0.2$, $k_1 = -5$, $k_2 = 7$

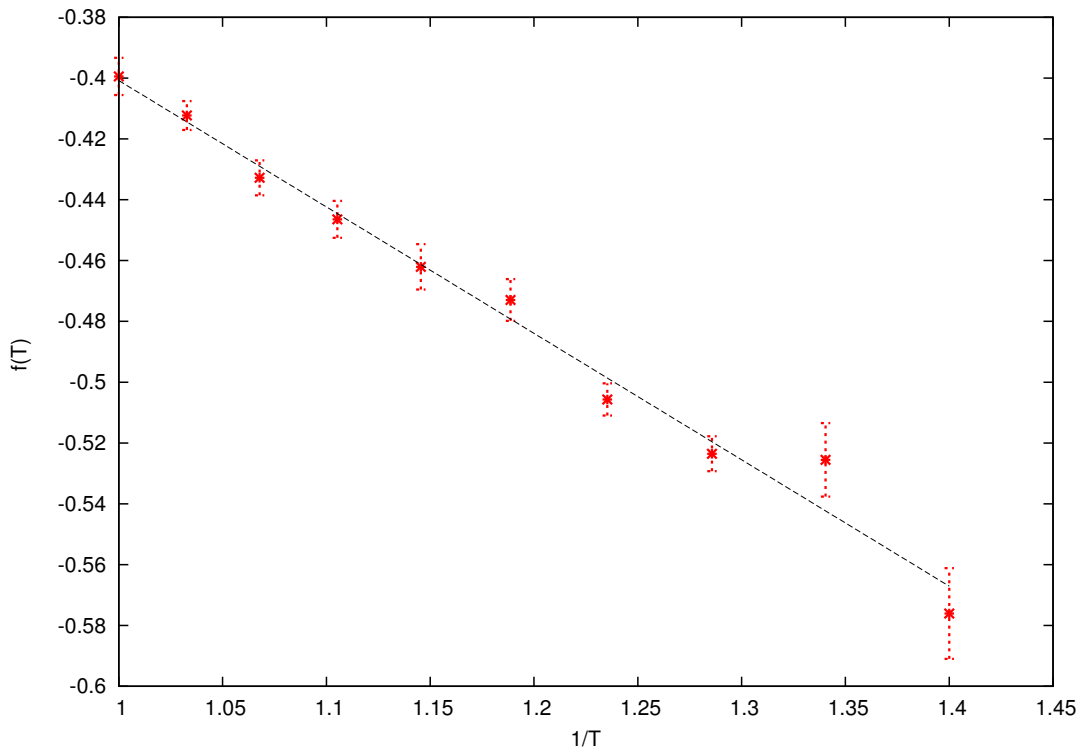


Рис. 8: Зависимость $f(t)$ при нулевом токе от температуры, полученная в результате аппроксимации. $\alpha = 0.2$, $k_1 = -5$, $k_2 = 7$

Из полученных результатов следует, что:

$$k(I, T) = k(0, T)e^{-\frac{I}{I_1 k_B T}} \quad (29)$$

$$k(I, T) = ae^{-\frac{E_b}{k_B T}(1 + \frac{I}{I_c})} \quad (30)$$

Т.е. и при наличии взаимодействия со спин-поляризованным током реализуется закон Аррениуса для константы скорости переходов.

3.3 Переход к каноническому уравнению Ландау-Лифшица.

Как было отмечено выше, система под воздействием тепловых флуктуаций совершает переходы из одного устойчивого состояния в другое. При этом, выполнено локальное распределение Больцмана. Оказывается, что под воздействием спинового тока последнее нарушается [6]- [7]. Рассмотрим уравнение ЛЛ с учетом члена Слончевского, предполагая трение и величину тока малыми:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}] - \alpha \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}]] - \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{I}]], \quad (31)$$

Введем замену переменных:

$$\mathbf{H}_r = \mathbf{H}_{eff} + \alpha^{-1} \mathbf{I} \quad (32)$$

Тогда:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r] - \alpha \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r]] + \alpha^{-1} \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times \mathbf{I}], \quad (33)$$

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right)_{LL} + \alpha^{-1} \gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{I}], \quad (34)$$

где

$$\left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right)_{LL} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r] - \alpha \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r]] \quad (35)$$

Известна связь между значениями производной по времени от произвольного вектора K в неподвижной и вращающейся системах отсчета:

$$\left(\frac{dK}{dt} \right)_{вр} = \frac{dK}{dt} + [K, w] \quad (36)$$

Сравнивая (36) с (34) приходим к выводу, что если перейти во вращающуюся систему отсчета, то уравнение ЛЛ примет вид:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right)_{LL} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r] - \alpha \frac{\gamma}{M}[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_r]] \quad (37)$$

Мы перешли к каноническому уравнению Ландау-Лифшица, только теперь :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_r &= \mathbf{H}_{eff} + \alpha^{-1} \mathbf{I} \\ \frac{\partial \mathbf{H}_{eff}}{\partial t} &= -\alpha^{-1} \gamma[\mathbf{H}_{eff}, \mathbf{I}] \end{aligned} \quad (38)$$

4 Заключение

Подведем кратко основные результаты работы. Методом молекулярной динамики проведено моделирование термоиндуцированных переходов в системе из одного классического спина в поле анизотропии "легкая плоскость" и "легкая ось". Для этого решалось уравнение Ландау-Лифшица со случайной силой (полем) распределенной по Гауссову закону. Было показано, что для этой системы выполняется закон Аррениуса, найдены предэкспоненциальный множитель и барьер в законе Аррениуса. Исследовано взаимодействие спина со спин-поляризованным током в рамках теории Слончевского. И найдена зависимость эффективного барьера от амплитуды тока.

Список литературы

- [1] M.D. Stiles, A. Zangwill, Physical Review B 66, 014407 (2002).
- [2] J. Lindner et al. The influence of Magnetic Anisotropy on Current-Induced Spindynamics, Springer Tracts in Modern Physics 246.
- [3] J.C. Slonczewski, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 159 (1996) L1-L7
- [4] B Skubic, J Hellsvik, L Nordstrom and O Eriksson. Journal of physics: condensed matter 20 (2008) 315203
- [5] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Harmonic transition state theory of thermal spin transitions, Physical Review B 85, 184409 (2012)
- [6] L. Li and S. Zhang, Phys. Rev. B 69, 134416 (2004).
- [7] D. M. Apalkov and P. B. Visscher, Phys. Rev. B 72, 180405 (2005).