

## Аннотация

В работе выполнено компьютерное моделирование процесса перемагничивания тонких антиферромагнитных пленок с решеткой антиточек. Для моделирования использована модель Изинга и алгоритм Метрополиса. Построены петли гистерезиса для пленок с различными значениями толщины и размера пор. Вычислена зависимость коэрцитивной силы от толщины пленки и размера пор.

## Введение

Тонкие пленки с массивом пор, расположенном в узлах прямоугольной или гексагональной решетки, являются перспективным материалом для устройств спинтроники [1]. Главная особенность этих метаматериалов состоит в возможности регулирования их магнитных свойств с помощью изменения геометрических размеров пор и расстояния между ними [2, 3]. Для эпитаксиальных пленок, выращенных на подложках, экспериментально наблюдается присутствие оси легкого намагничивания, перпендикулярного подложке [4]. Эта же анизотропия наблюдается для тонких пленок с упорядоченным массивом пор [3].

**Целью моделирования** было исследование зависимости намагниченности системы от внешнего магнитного поля. Намагниченность системы вычислялась как среднее значение спина системы.

## Модель

Магнитное поведение тонких пленок может быть описано с помощью **модели Изинга**. Гамильтониан такой системы:

$$H = -J \sum_{i,j} S_i S_j + \mu_B h_0 \sum_i S_i, \quad (1)$$

$h_0$  – напряженность внешнего магнитного поля.  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $J$  – константа обменного взаимодействия.

При компьютерном моделировании использовались относительные единицы для температуры и напряженности магнитного поля:

$$T = \frac{k_B t}{J}, \quad h = \frac{\mu_B h_0}{J}, \quad (2)$$

$k_B$  – постоянная Больцмана,  $t$  – термодинамическая температура.

Моделирование проводилось для систем с кубической кристаллической решеткой размером  $L \times L \times D$ .  $D$  – толщина пленки в монослоях ( $ML$ ).  $L$  – линейные размеры пленки. Пленка располагалась параллельно плоскости  $OXY$  и была ограничена плоскостями  $z = 0$  и  $z = D - 1$ . Спины направлены вдоль оси  $OZ$ . Магнитное поле также было направлено вдоль оси  $OZ$ . В направлениях  $OX$  и  $OY$  накладывались периодические граничные условия для описания бесконечной пленки.

Намагниченность системы вычислялась как среднее значение спина системы:

$$m = \frac{\sum_i S_i}{N}, \quad (3)$$

$N$  – общее количество спинов в системе.

Для поиска состояния системы применялся **метод Монте-Карло, алгоритм Метрополиса**. Для каждого значения напряженности магнитного поля вычислялась намагниченность системы. График зависимости намагниченности от напряженности магнитного поля представляет собой петлю гистерезиса. Точка пересечения петли гистерезиса определяет коэрцитивную силу для системы.

Компьютерный эксперимент выполнялся для систем с линейным размером  $L=64$ . Толщина пленки изменялась от  $D = 2ML$  до  $D = 16ML$  с шагом  $\Delta D = 2ML$ . Параметры магнитного поля:  $h_{max} = 0.5$ ,  $\Delta h = 0.01$ . Система находилась при температуре  $T = 2.5$ , что обеспечивает ферромагнитную фазу. Сначала исследовались сплошные пленки. После этого в пленке делались поры с линейным размером  $a \times a$ . Изучались пленки с двумя значениями размера пор:  $a = 4$  и  $a = 8$ . Поры размещались в узлах квадратной сетки с периодом  $d = 16$ .

## Результаты

1. Ширина петли гистерезиса увеличивается с ростом толщины пленки, что свидетельствует об увеличении энергии, необходимой для перемагничивания. Эта закономерность наблюдается как для непрерывных пленок, так и для пленок с массивом пор. (Figure 1)
2. Решетка антиточек уменьшает ширину петли гистерезиса. Увеличение размера пор в пленке снижает коэрцитивную силу. Реализация массива антиточек в тонких пленках позволяет снижать энергетические затраты на перемагничивание тонких пленок.
3. Коэрцитивная сила растет нелинейно с увеличением толщины как для непрерывных пленок, так и для пленок с решеткой антиточек (Figure 2). При толщине пленки более  $D = 12ML$  коэрцитивная сила стремится к постоянному значению.
4. Увеличение размеров пор снижает коэрцитивную силу для всех значений толщины пленки.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 23-29-00108.

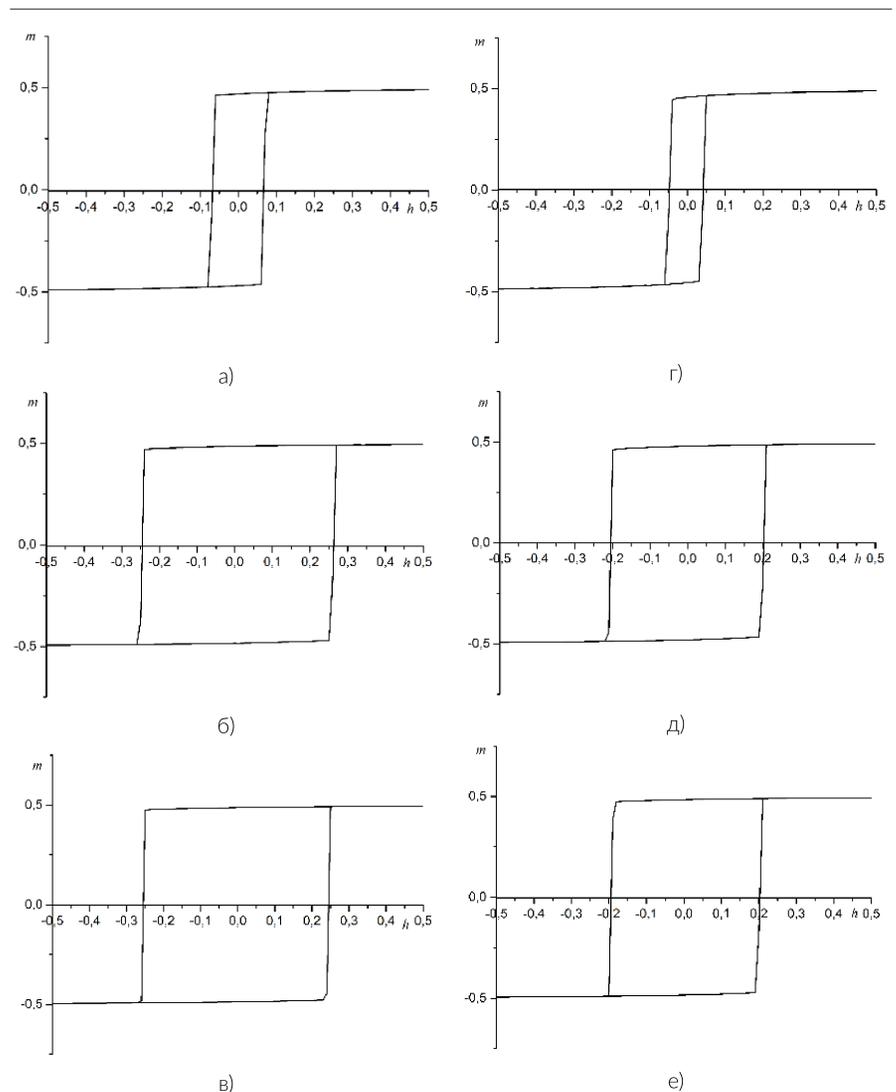


Figure 1. Примеры петель гистерезиса для непрерывной пленки и пленки с порами размером  $a = 8$  при различной толщине пленки: а) непрерывная пленка при  $D = 2ML$ , б) непрерывная пленка при  $D = 8ML$ , в) непрерывная пленка  $D = 16ML$ , г) пленка с порами  $a = 8$  толщиной  $D = 2ML$ , д) пленка с порами  $a = 8$  толщиной  $D = 8ML$ , е) пленка с порами  $a = 8$  толщиной  $D = 16ML$ .

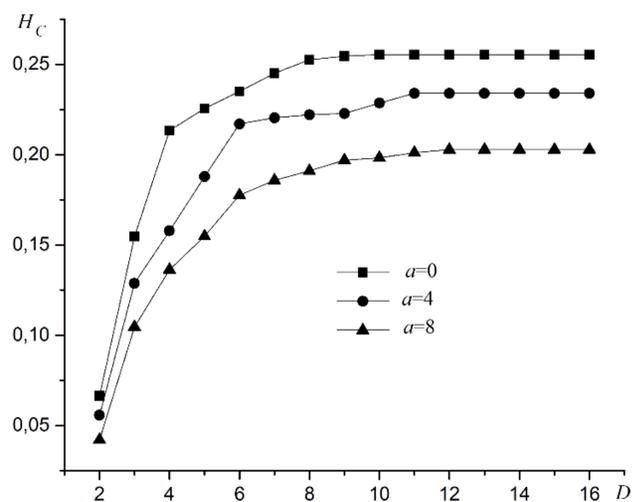


Figure 2. Зависимость коэрцитивной силы  $H$  от толщины пленки  $D$  для сплошной пленки ( $a = 0$ ) и пленок с массивом пор, имеющих линейные размеры  $a = 4$  и  $a = 8$ .

## Выводы

Из полученных результатов следует, что наличие в плёнке массива пор, а также размер этих пор, влияют на величину коэрцитивной силы, возникающей в системе. Увеличение размера пор снижает коэрцитивную силу. Изменяя геометрические параметры системы можно влиять на магнитные свойства плёнки.

## Литература

- [1] D.C. Leitao et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 066007. DOI: 10.1088/0953-8984/25/6/066007
- [2] C.C. Wang, A.O. Adeyeye, N. Singh. // Nanotechnology. 2006. V. 17. P. 1629-1636. DOI: 10.1088/0957-4484/17/6/015
- [3] S.V. Belim, I.V. Bychkov. // Nanomaterials. 2022. V. 12. P. 3705. DOI: 10.3390/nano12203705
- [4] S. Tacchi et al. //IEEE Transactions on Magnetics. 2010. V.46, N.6. P. 1440-1443. DOI: 10.1109/TMAG.2009.2039775