КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В. П. СОХАЦЬКИЙ, М. В. ПЕТРИЧУК

КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ У ФІЗИЦІ

МЕТОДИКИ МОДЕЛЮВАННЯ МАГНІТНИХ, ЕЛЕКТРИЧНИХ ТА ОПТИЧНИХ ЯВИЩ У ТОНКОШАРОВИХ, ОБ'ЄМНИХ ТА КОМПОЗИТНИХ СТРУКТУРАХ

Частина 1

НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНИЙ ПОСІБНИК

ФАКУЛЬТЕТ РАДІОФІЗИКИ, ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ СИСТЕМ
2021

УДК 537
ББК 22.33

Автори:

В. П. СОХАЦЬКИЙ, М. В. ПЕТРИЧУК

Рецензенти:

д-р. фіз.-мат. наук, проф. В.С.Овечко,
канд. фіз.-мат. наук, доц. В.Є.Короновський

Рекомендовано до друку Вченою радою факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем
(протокол № від 10 травня 2021 року)

Комп'ютерні технології у фізиці. Методики моделювання магнітних, електричних та оптичних явищ у тонкошарових, об'ємних та композитних структурах. Частина 1 : навчально-методичний посібник/ В. П. Сохацький, М. В. Петричук. - К., 2021. - 25 с.

Навчально-методичний посібник розглядає методи моделювання процесів перемагнічування магнітних середовищ, що відбуваються під дією прикладених полів, електричних струмів або оптичного опромінювання. В ньому разом із необхідними теоретичними відомостями з курсів Електрики, Магнетизму, Оптики, розглядаються традиційні методики побудови теоретичних моделей та застосування комп'ютерів для обрахунку даних в рамках розглянутих моделей.

Дана робота покликана допомогти студентам більш глибоко опанувати лекційний матеріал, свідомо використовувати фізичні закони, знаходити відповіді на запитання, що виникають під час самостійного вивчення курсу, набути практичних навичок з розв'язування наукових задач за допомогою комп'ютерного моделювання.

Призначено для магістрів фізичних та радіофізичних спеціальностей вищих учбових закладів. Може бути корисною студентам і викладачам фізико-математичних факультетів.

© Сохацький В. П., Петричук М. В., 2021
© Київський національний університет імені Тараса Шевченка, факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем, 2021

ВСТУП

Спінтроніка - спінова електроніка, - розділ фізики квантових і магнітних явищ, що досліджує безпосередню взаємодію спіна речовини із внутрішніми і зовнішніми факторами [7-11]. Спінтроніка, на відміну від традиційної електроніки, яка оперує тільки зарядом електрона, використовує також і спін в якості такого функціонального елемента речовини, який може змінювати свій стан і зберігати його в залежності від заданих впливаючих факторів. Таким чином, спінтроніка, оперуючи ще і спіном електрона поряд із його зарядом, може мати більшу функціональність, ніж традиційна напівпровідникова електроніка. При цьому переорієнтація спіна може відбуватись із значно нижчими енергетичними витратами, ніж перенос заряда, тому характеристики енерговитрат, а також швидкодія пристроїв спінтроніки може суттєво перевищити показники традиційних зарядових пристроїв. Такі перспективи особливо приваблюють розробників електроніки через те, що технології, які нині застосовуються практично досягли межі своєї можливої реалізації, в той час як спінові системи можуть стати у нагоді для подальшого нарощування густини розташування функціональних елементів. Також важливо згадати про тепловиділення, як один із параметрів, що суттєво обмежує можливості інтегральних елементів. Спінові переорієнтації дозволяють зменшити питомі енерговитрати принаймі на порядок, що дасть змогу далі нарощувати, наприклад, чисельність транзисторів в процесорі без побоювання перегріву усієї його конструкції.

Проблемою спінтроніки, зокрема, є мала довжина когерентності, тобто мала відстань дрейфу носіїв спіну (електронів), на якій зберігається початкова поляризація. Також є проблеми з ефективністю інжекції спінів та їх детектуванням. Над цими проблемами працюють дослідники спінових явищ та розробники спін-електронної апаратури.

Задачею даного методичного посібника є дати уявлення про новий напрямок досліджень в фізиці твердого тіла та електроніці, про методи реалізації функціональних пристроїв на основі цього напрямку, ознайомити із методиками теоретичної та експериментальної наукової роботи і опанувати підходи до самостійного розв’язку прикладних наукових задач.

1. Основні відомості з курсу “Магнетизм”.

(основні означення, закони, формули та ін. відомості з курсу «Електрика і магнетизм» [1-6])

1. “**Закон Кулона**” (аналог електричного закону) для сили F взаємодії двох умовних “магнітних зарядів” m_1 та m_2: $F = k \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{r^2}$, де k – константа взаємодії (в системі одиниць СІ, в гаусовій системі k=1) r – відстань між взаємодіючими зарядами.

2. **Сила Лоренца** (магнітна сила F_m, що діє на заряд, який рухається в магнітному полі): $F_m = q \cdot \left[\vec{\mathrm{v}} \cdot \vec{B}\right]$, де q - заряд, $\vec{\mathrm{v}}$ - швидкість руху заряду, $\vec{B}$ - вектор індукціії магнітного поля, в якому рухається заряд (в гаусовій системі в правій частині додається множник $1/c$).

3. **Напруженість магнітного поля** $\vec{H}$ – це сила, що діє на одиничний магнітний заряд: $H = F/m_i = m/r^2$ (в гаусовій системі).

<u>Прим</u>. *Для утворення векторної форми законів п.***1** *та п.***3** *праву частину рівнянь необхідно домножити на одиничний вектор в напрямку дії сили або силової лінії поля в заданій точці.*

4. **Магнітний момент диполя** $\vec{p}_m = m \cdot \vec{l}$, де $\vec{l}$ - вектор, що зв’язує точкові заряди m та $-m$. Для плоского контура площею S зі струмом I : $\vec{p}_m = I \cdot S \cdot \vec{\mathrm{n}}$ ($\vec{\mathrm{n}}$ - вектор нормалі до площини контура).

5. **Намагніченість** $\vec{M}$ магнітного матеріалу визначається як магнітний дипольний момент $\vec{p}_m$ одиниці невеликого об’єму V: $\vec{M} = \vec{p}_m / V$.

6. *а*) На магнітний момент, що знаходиться в однорідному магнітному полі, діє момент сил $\vec{N}$: $\vec{N} = \left[\vec{H} \times \vec{p}_m\right]$;

***б*)** На магнітний момент $\vec{p}_m$, поміщений в неоднорідне магнітне поле, діє сила: $\vec{F} = \left(\vec{p}_m \cdot \vec{\nabla}\right) \cdot \vec{H}$, або для одновимірного випадку, коли поле направ-

лено вздовж однієї осі x: $\vec{F} = \vec{p}_m \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial x}$, ($\vec{\nabla}$ - оператор набла або векторний оператор Гамільтона: $\vec{\nabla} = \vec{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$) .

7. Намагніченість $\vec{M}$ і напруженість поля $\vec{H}$ пов'язані між собою співвідношенням $\vec{M} = \chi \cdot \vec{H}$, де χ - магнітна сприйнятливість речовини.

8. Магнітна індукція пов'язана із напруженістю поля і індукцією $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}$ або $\vec{B} = \mu \cdot \vec{H}$, де коефіцієнт $\mu = 1 + 4\pi\chi$ - магнітна проникність (тут все у гаусовій системі одиниць). Такий же зв'язок між $\vec{B}$ та $\vec{H}$ в системі одиниць СІ : $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$ та $\vec{B} = \mu \cdot \mu_0 \cdot \vec{H}$, $\mu = 1 + \chi$.

9. **Закон Релєя** характерної залежності намагніченості магнетика від напруженості прикладеного зовнішнього поля: $\vec{M} = \chi \cdot \vec{H} + \frac{a \cdot H^2}{8\pi}$

(a – константа, що залежить від матеріалу).

10. ***а*) Індукція магнітного поля** $\vec{B}$, яке створюється в деякій точці зарядом q, що рухається рівномірно зі швидкістю $\vec{v}$ (в системі одиниць СІ): $\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{q \cdot [\vec{v} \times \vec{r}]}{r^3}$, де $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м - магнітна стала; $\vec{r}$ - радіус-вектор від точки знаходження заряду в точку спостереження;

***б*)** Враховуючи зв'язок напруженості електричного поля $\vec{E}$ із зарядом q і відстанню $\vec{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 r^2}$, можна представити попередній вираз для **магнітного поля рухомого заряда** т.ч.: $\vec{B} = \varepsilon_0\mu_0 \cdot [\vec{v} \times \vec{E}] = \frac{[\vec{v} \times \vec{E}]}{c^2}$, де

$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} = 3 \cdot 10^8$ м/с - швидкість світла у вакуумі (електродинамічна стала).

11. **Закон Біо-Савара** для індукції магнітного поля, що створюється струмом I (тобто рухомими зарядами), який протікає по елементу провідника нескінченно малої довжини $d\vec{l}$: $d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{I \cdot \left[d\vec{l} \times \vec{r}\right]}{r^3}$.

12. ***а*) Теорема Гауса для магнітного поля**: $\oint \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0$ - потік вектора магнітної індукції крізь будь-яку замкнену поверхню дорівнює 0 ;
в диференціальній формі: $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ - дивергенція вектора $\vec{B}$ всюди дорівнює 0 ;

***б*)** (інтегральна форма) циркуляція вектора магнітної індукції $\vec{B}$ по довільному контуру дорівнює алгебраїчній сумі струмів $I = \sum I_k$, що охоплюються даним контуром, помноженій на магнітну сталу μ_0: $\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \cdot I$ або $\oint \vec{H} \cdot d\vec{l} = I$; у диференціальній формі: $\left[\vec{\nabla} \times \vec{B}\right] = \mu_0 \cdot j$, де j – густина струму в даній точці. Т.ч., магнітне поле є соленоїдальним, на відміну від потенціального електричного поля, для якого $\left[\vec{\nabla} \times \vec{E}\right] = 0$.

13. **Закон Ампера:** Сила, що діє на векторний елемент довжини $d\vec{l}$ тонкого провідника зі струмом, який знаходиться у магнітному полі індукцією $\vec{B}$:

$$d\vec{F} = I \cdot \left[d\vec{l} \times \vec{B}\right] .$$

14. Робота амперових сил при елементарному переміщенні контура зі струмом I: $\delta A = I \cdot d\Phi$, де $d\Phi$ – зміна (приріст) магнітного потоку ($d\Phi = B \cdot dS$) крізь контур.

15. **Класифікація речовин по їх магнітним властивостям.**

1. ***Діамагнетики***. Спіни скомпенсовані, сумарний спонтанний момент атома дорівнює 0. При накладанні магнітного поля, за законом індукції Фарадея (правило Лєнца), в атомі виникає додаткова складова руху електронів, яка створює магнітний момент, направлений проти прикладеного поля. Через це діамагнетик виштовхується із поля і його діамагнітна проникність μ незначно менше одиниці - $\mu \leq 1$.

2. ***Парамагнетики.*** Атоми мають спонтанний нескомпенсований магнітний момент. Під дією прикладеного поля магнітні моменти прецесують навколо нього і утворюють переважну намагніченість в напрямку поля, що впливає на проникність приблизно втричі сильніше, ніж протинаправлений

діамагнітний ефект, який протидіє полю. Через це парамагнетик втягується в поле і його відносна магнітна проникність трохи перевищує одиницю - $\mu \geq 1$.

3 а). ***Феромагнетики***. Мають спонтанну намагніченість, обумовлену сильною обмінною взаємодію. Через значне зростання магнітостатичної енергії при паралельній орієнтації магнітних моментів у великому об'ємі, може відбуватись розбиття на області спонтанної намагніченості (домени), орієнтовані по-різному, в залежності від величини обмінної константи, магнітної анізотропії, намагніченості насичення та ін. характеристик речовини. Швидке зростання намагніченості в прикладеному полі призводить до великих значень відносної проникності - від десятків до тисяч і більше одиниць.

б) **Антиферомагнетики** – різновид феромагнетиків, що мають дві магнітні підгратки із однаковими спонтанними намагніченостями, орієнтованими протилежно. Таким чином, їх результуюча намагніченість є скомпенсованою. Втім, можлива і деяка неколінеарність намагніченостей підграток, обумовлена порушенням симетрії кристалічної гратки, що може призводити до утворення невеликого результуючого магнітного момента. Зовнішнє магнітне поле призводить до намагнічування подібного до такого, як відбувається у феромагнетиках.

в) **Феримагнетики**, подібно до антиферомагнетиків, також мають дві або більше магнітних підграток, які сильно відрізняються за намагніченістю і тому нескомпенсовані. Через це феримагнетики мають велику спонтанну намагніченість і при прикладанні зовнішнього магнітного поля відбувається поступова переорієнтація магнітних моментів у напрямку поля.

<u>Особливістю застосування антиферомагнетиків у спінтроніці</u> є їх властивість набувати результуючої намагніченості через невеликі відхилення векторів намагніченості від протилежних напрямків. У зовнішньому полі намагніченості підграток прецесують і тоді відповідна результуюча намагніченість може змінювати свій напрямок. Швидкість такої переорієнтації на кілька порядків перевищує швидкість звичайного перемагнічування феромагнетиків шлхом повороту вектора намагніченості, тому такі частково нескомпенсовані (т. зв. слабкі) антиферомагнетики можуть перемагнічуватись зі значно більш високими частотами.

Завдання для самостійної роботи. *Побудувати графічно петлю магнітного гістерезису (у повному діапазоні зміни прикладеного зовнішнього магнітного поля H від $-H_m$ до $+H_m$, тобто графік залежності величини індукції магнітного поля B від напруженості поля H, яке перемагнічує феромагнітне середовище із відносною магнітною проникністю μ_i, відповідно*

до наведених нижче формул т. зв. Релєєвської моделі магнітного гістерезису (формул Релэя):

$$B(H)=\mu_{\text{o}}\cdot\left[\left(\mu_i+\alpha_R\cdot H_m\right)\cdot H+\frac{\alpha_R}{2}\cdot\left(H_m^2-H^2\right)\right]$$ *- (пряма гілка петлі гістерезису),*

$$B(H)=\mu_{\text{o}}\cdot\left[\left(\mu_i+\alpha_R\cdot H_m\right)\cdot H-\frac{\alpha_R}{2}\cdot\left(H_m^2-H^2\right)\right]$$ *- (обернена гілка петлі магнітного гістерезису).*

В формулах позначено: H_m *- максимальне значення напруженості прикладеного магнітного поля;* α_R *- коефіцієнт Релєя;* $\mu_{\text{o}}=4\pi\cdot10^{-7}$ *Гн/м - магнітна константа - проникність вакуума (в системі СІ, в гаусовій системі вона відсутня, тобто дорівнює одиниці).*

Величина поля H_m *може бути взята будь-якою (для магнітом'яких матеріалів вона лежить в діапазоні від кількох десятків до кількох сотен Ерстед, а для магнітожорстких звичайно знаходиться в діапазоні одиниць кілоЕрстед).*

Відносна магнітна проникність феромагнітних речовин μ_{i} *переважно знаходиться в діапазоні від кількох сотен до кількох тисяч відносних (тобто безрозмірних) одиниць.*

Коефіцієнт Релєя α_R*, взагалі кажучи, підбирається в залежності від конкретного матеріалу, але для простого (тобто якісного, не чисельного) моделювання (без прив'язки до конкретної речовини) може бути вибраний із таких міркувать, щоб добуток* $\alpha_R\cdot H_m$ *був співрозмірний із також вибраним значенням* μ_{i}.

2. Модель перемагнічування Стонера-Вольфарта.

Модель Стонера-Вольфарта (*Stoner-Wohlfarth model*) є широко вживаною моделлю для намагнічування однодоменних феромагнетиків [1]. Вона просто описує магнітний гістерезис і корисна для моделювання процесів перемагнічуання малих магнітних частинок, які можуть застосовуватись у магнітних накопичувачах, біо-, гео- та палеомагнетизмі. Модель була розроблена Едмундом Кліфтоном Стоунером та Еріхом Петер Вольфартом та опублікована у 1948 році. [1] Вона включала чисельні розрахунки інтегрованої реакції випадково орієнтованих магнітів. Оскільки це було зроблено ще у

докомп'ютерну епоху, то розрахунки здійснювались вручну та за допомогою тригонометричних таблиць.

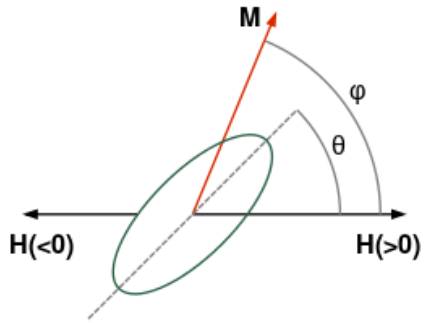


Рис.1. Ілюстрація змінних, використаних у моделі Стонера-Вольфарта. Пунктирна лінія - легка вісь частинки.

У моделі Стонера-Вольфарта намагніченість, представлена вектором ***M***, не змінюється в межах ферромагнетика. Цей вектор повертається по мірі зміни магнітного поля ***H***. Магнітне поле змінюється лише по одній осі; його скалярне значення H позитивне в одному напрямку і негативне у протилежному напрямку. Припускається, що феромагнетик має одноосну магнітну анізотропію з константою анізотропії K_u. При зміні магнітного поля намагніченість обмежена площиною, яка містить напрямок магнітного поля та легку вісь анізотропії. Тому її (намагніченість) можна представити одним кутом φ між вектором намагніченості ***M*** та полем ***H*** (рис.1). Кут між полем ***H*** і легкою віссю анізотропії позначений як θ.

Сумарною магнітною енергією такої системи буде сума енергій анізотропії (перший доданок) та магнітостатичної (другий):

$$E = K_u \cdot V \cdot \sin^2(\varphi - \theta) - \mu_0 \cdot M_S \cdot V \cdot H \cdot \cos\varphi \qquad (1)$$

де V - об'єм магніту, M_S - намагніченість насичення, μ_0 - вакуумна проникність. Перший доданок рівняння (1) - це магнітна анізотропія, другий – магнітостатична енергія зв'язку з прикладеним полем (часто називається енергією Зеемана). Стонер і Вольфарт нормалізували це рівняння:

$$\eta = \frac{E}{2 \cdot K_u \cdot V} = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \cdot \cos[2(\varphi - \theta)] - h \cdot \cos\varphi \qquad (2)$$

де $h = \mu_0 \cdot M_S \cdot H / 2 \cdot K_u$. Намагніченість у даному напрямку буде механічно рівноважною, якщо сили, що на неї діють, дорівнюють нулю. Це має місце, коли перша похідна енергії по напрямку намагнічування дорівнює нулю:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \cdot \sin[2(\varphi - \theta)] + h \cdot \sin\varphi = 0 \qquad (3)$$

Цей напрямок буде стійким до збурень, якщо він знаходиться в енергетичному мінімумі, маючи позитивну другу похідну:

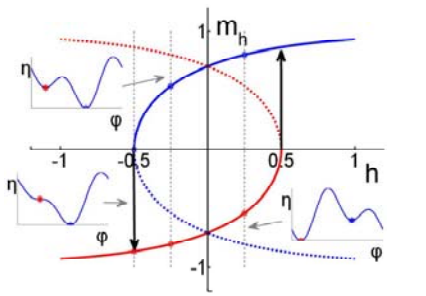


Рис.2. Приклад розв’язку на основі моделі Стонера-Вольфарта. Обидві величини - h і m_h - знаходяться в інтервалі від -1 до +1. Суцільні червоні та сині криві - мінімуми енергії, пунктирні червона та синя лінії - енергетичні максимуми. Енергетичні профілі входять до 3-х вертикальних профілів (вставки).

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial \varphi^2} = \cos[2(\varphi - \theta)] + h \cdot \cos\varphi > 0 \qquad (4)$$

За відсутності магнітного поля, енергія магнітної анізотропії мінімальна при напрямку намагніченості вздовж легкої осі. У великому полі вектор намагніченості орієнтується в напрямку поля.

Криві гістерезису.

Для кожного кута θ між легкою віссю та полем, рівняння (3) має розв’язок, який складається із двох результуючих кривих. Тривіальний розв’язок для цих кривих отримується варыацыэю φ і розв’язком для h. Існує одна крива для φ між 0 і π, а інша - для φ між π і 2π; розв’язки при φ = 0 та π відповідають $h=\pm\infty$. [1]

Оскільки намагніченість у напрямку поля $M_S \cdot \cos\varphi$, ці криві зазвичай накладаються в нормованій формі m_h vs. h, де $m_h=\cos\varphi$ є компонентом намагніченості у напрямку поля. Приклад показано на рис.2. Суцільні червоні та сині криві зв'язують стійкі напрямки намагнічування. Для полів $-1/2 \le h \le 1/2$ дві криві перекриваються і є два стійких напрямки. Це область, де має місце гістерезис. Включено три енергетичних профілі (вставки). Червоні та сині зірки є стійкими напрямками намагнічування, що відповідають мінімальним енергіям. В точках перетину вертикальних пунктирних ліній з червоними та синіми пунктирними лініями, напрями намагнічування є максимумами енергії та визначають енергетичні бар'єри між станами.

При звичайному вимірюванні магнітного гістерезису, h починається з великого позитивного значення і зменшується до великого негативного значення. Напрямок намагнічування починається на синій кривій. При h=0,5 з'являється червона крива, але при h>0 синій стан має нижчу енергію, оскільки він ближчий до напрямку магнітного поля. Коли поле стає негативним, червоний стан має нижчу енергію, але намагніченість не може відразу перейти до цього нового напрямку, оскільки між ними є енергетичний бар'єр (на вставках). Втім при h=-0,5 енергетичний бар'єр зникає, а в більш негативних полях синього стану більше не існує. Тому він повинен перейти до червоного стану. Після цього стрибка намагніченість залишається на черво-

ній кривій, поки поле не збільшується до h=0,5, де він перестрибує на синю криву. Зазвичай наноситься тільки петля гістерезису; енергетичні максимуми є лише цікавими, якщо врахувати ефект теплових коливань [1].

Модель Стонера-Вольфарта є класичним прикладом магнітного гістерезису. Петля симетрична (по обертанню на 180 °) по формі і стрибки відбуваються при $h=\pm h_S$, де h_S відоме як поле переключення. Весь гістерезис має місце при $\pm h_S$.

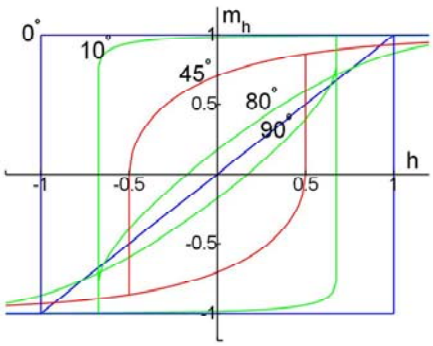


Рис.3. Деякі криві магнітного гістерезису, отримані методом С-В для різних кутів між полем та легкою віссю анізотропії.

Форма петлі гістерезису має сильну залежність від кута між магнітним полем і легкою віссю (рис.3). Якщо вони паралельні (θ=0), то петля гістерезису є найбільшою (при $m_h=h_S=1$ в нормалізованих одиницях). Намагніченість у початковому положенні є паралельною полю і не обертається, поки не стає нестійким і не перестрибує у зворотньому напрямку. Загалом, чим більший кут, тим більше відбувається поворотне обертання. З іншої крайності θ=90°, коли поле перпендикулярне легкій осі, стрибків не відбувається. Намагніченість безперервно повертається з одного напряму в інший (хоча і може бути два варіанти напрямку обертання).

Для заданого кута θ поле перемикання є точкою, в якій розв'язок перемикається з мінімуму енергії ($\partial^2\eta/\partial\varphi^2>0$) до максимуму енергії ($\partial 2\eta/\partial\varphi 2<0$). Таким чином, його можна обчислити безпосередньо, вирішивши рівняння (3) разом з $\partial 2\eta$ / $\partial\varphi 2$ = 0. Розв'язок $h_S=\frac{\left(1-t^2+t^4\right)^{1/2}}{1+t^2}$, де $t=\left(\tan\theta\right)^{1/3}$. У нормалізованих одиницях $0{,}5\le h_S\le 1$.

Альтернативним способом представлення розв'язку для перемикання поля є розділення векторного поля h на компоненту $h_{\|}=h\cdot\cos\theta$, паралельну легкій осі та перпендикулярну компоненту $h_{\perp}=h\cdot\sin\theta$. Тоді $h_{\|}^{2/3}+h_{\perp}^{2/3}=1$. Якщо побудувати графічно компоненти одна навпроти одної, в результаті можна отримати астроїду Стонера-Вольфарта. Петля магнітного гістерезису може бути розрахована геометричною побудовою із цієї астроїди.

Завдання для самостійної роботи.

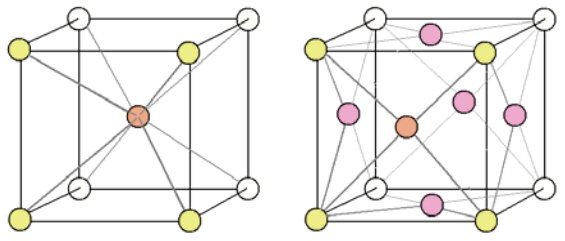


Рис.4. Об'ємно- та гранєцентрована кристалічні гратки.

Багато які з металів (а також і неметалів) можуть мати як об'ємноцентровану, так і гранєцентровану кубічну кристалічну гратку (на рис.4 зліва об'ємно-, а справа гранєцентрована гратка). При цьому перехід від одного типу кристалічного впорядкування до іншого відбувається із досить малою зміною загального об'єму кристалічного тіла. Отже, нехтуючи такою зміною об'єму при фазовому переході, визначить відношення найменших відстаней між атомами кристалу відповідно в гранєцентрованій та об'ємноцентрованій гратках.

Примітки до розв'язку. *У першу чергу, необхідно визначити кількість атомів на одну елементарну комірку обох типів кристалів. Наприклад, в зображеній зліва об'ємноцентрованій гратці на кожну комірку припадає по одному атому всередині кубічної комірки і по 1/8-й кожного з 8-ми атомів у вершинах куба (по 1/8-й через те, що кожен атом вершини куба ділиться між 8-ма суміжними (у куті) кубічними комірками). Таким чином, на одну комірку об'ємноцентрованої гратки припадає по 2 атоми.*

Кількість атомів на одну комірку гранєцентрованої гратки подібним же чином можна визначити самостійно, також, як і зв'язок (тобто співвідношення) між найменшою відстанню між атомами в обох гратках і сталою відповідної гратки. Незмінність об'ємів граток (відповідно до умови) призводить до незмінності об'єму, який припадає на один атом. Користуючись цим фактом, можна визначити шукане співвідношення між найменшими відстанями між атомами в двох типах граток.

3. Моделювання перемагнічування шаруватих структур за допомогою енергетичних діаграм.

Принцип моделювання перемагнічування на основі моделі Стонера-Вольфарта надалі розглядатиметься на прикладі сендвіч-структури. Остання представляє собою (у найпростішому випадку) тришарову тонку плівку (складу, наприклад Fe/Cu/Fe, рис.5*а*), нанесену на немагнітну підкладинку

(Si, скло, полімер тощо). Два крайніх шари плівки є феромагнітними, а прошарок між ними немагнітний (провідний у даному випадку з міді - Cu, але може бути і діелектричним, серед яких найбільш поширені MgO та Al_2O_3).

При технологічному створенні такої структури методом термічного розпорошення (коли матеріал, що має наноситися, випаровується нагрівом і, осідаючи на підкладинку, утворює суцільний шар) кожен її шар напилюється з окремого джерела. Оскільки ці джерела рознесені у просторі, то кут падіння (осідання) речовини на підкладинку для кожного матеріалу виявляється різним. Це може призводити до утворення одноосної анізотропії, оскільки розпилюваний під кутом матеріал має тенденцію до осідання паралельними терасами (рис.5*б,в*) і намагнічування вздовж терас (пагорбів або западин) буде легшим, ніж у поперечному напрямку через різну величину розмагнічуючих факторів.

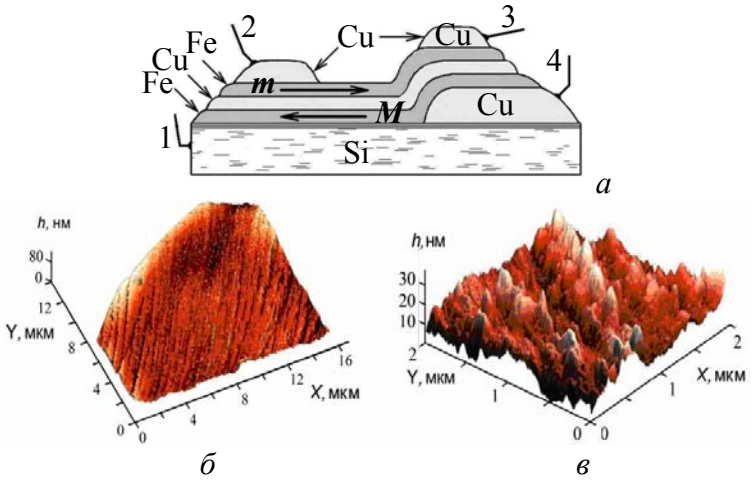


Рис.5. Схема шаруватої структури Fe/Cu/Fe на сіліконовій підкладинці (1) з мідними електродами 2,3,4 (*а*) та профіль поверхні шару Fe з рельєфними смугами на поверхні вздовж осі одноосної анізотропії (*б,в*)

У класичній моделі Стонера-Вольфарта намагніченість, представлена вектором *M*, не змінюється в межах ферромагнетика. Цей вектор повертається по мірі зміни магнітного поля *H*. Магнітне поле змінюється лише по одній осі; його скалярне значення *H* позитивне в одному напрямку і негативне у протилежному напрямку. В нашому розгляді ми не можемо суворо притримуватись згаданих вище допущень, оскільки в тонких шарах в рівноважних умовах має місце розбиття на окремі магнітні домени (області спонтанної намагніченості). Але малі розміри доменів і характер їх плавного

перемагнічування (тобто без значних стрибків намагніченості) призводить до відносно невеликої похибки внаслідок згаданого допущення навіть при чисельних розрахунках, а якісно так і взагалі цілком адекватно відображає картину перемагнічування.

Припускається, що феромагнетик має одноосну магнітну анізотропію (з константою анізотропії K_u), вісь якої лежить в площині плівки. При зміні магнітного поля намагніченість обмежена площиною (тобто залишається весь час в площині), яка містить напрямок магнітного поля та легку вісь анізотропії. Тому її (намагніченість) можна представити кутом φ між вектором намагніченості M та полем H.

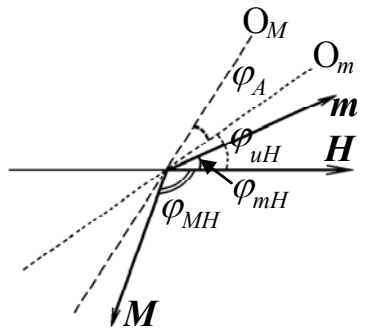


Рис.6. Напрямки осей, векторів та кутів в площині тонкоплівкової структури (орієнтація прикладеного магнітного поля H відносно напрямків осей 1-осної анізотропії верхнього (O_m) і нижнього (O_M) феромагнітних шарів).

Отже, суть методу С.-В. полягає у запису повної магнітної енергії, яка є сумою всіх складових енергій намагніченості і знаходженні таких кутів напрямку вектора $\vec{M}$, яким відповідає мінімум цієї енергії при даній величині магнітного поля $\vec{H}$. Залежність косинусів цих кутів від прикладеного поля є кривою перемагнічування або петлею магнітного гістерезису заданого магнітного шару.

Складові повної магнітної енергії.

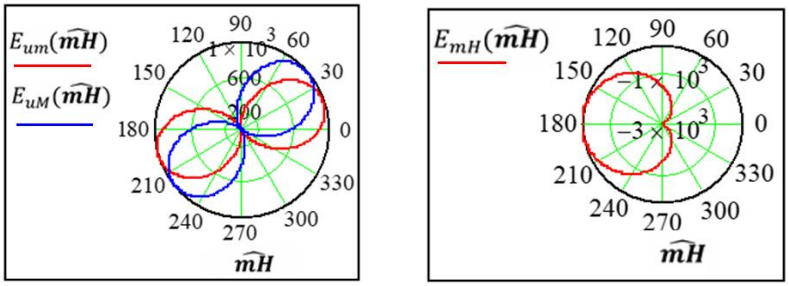
Геометрія розташування осей, векторів та кутів в площині тонкоплівкової структури зображена на рис.6.

1. Енергії одноосної анізотропії E_u векторів намагніченості верхнього $\vec{m}$ та нижнього $\vec{M}$ шарів плівкової структури:

$$^{m}E_u(\varphi_{mH}) = K_u \cdot \vec{m} \cdot \cos^2(\varphi_{mH} - \varphi_{uH}) \qquad (5a)$$

$$^{M}E_u(\varphi_{MH}) = K_u \cdot \vec{M} \cdot \cos^2(\varphi_{MH} - \varphi_{uH} - \varphi_A) \qquad (5б)$$

Прим. 1) Константа одноосної анізотропії залежить від матеріалу шару, його шорсткості, внутрішньої структури, тощо. Характерні значення становлять $K_u \approx 10^4$ ерг/см^3. Якщо точне значення K_u невідоме, то при моделюванні воно може прийматися в такому діапазоні, щоб енергія анізотропії була по порядку співрозмірна із іншими складовими енергії;



а *б*

Рис.7. Полярні діаграми залежності енергій: *а*) магнітної анізотропії від азимутального кута вектора намагніченості із віссю одноосної анізотропії відповідного шар; *б*) магнітостатики для одного вектора намагніченості $\vec{m}$ в прикладеному зовнішньому магнітному полі $\vec{H}$.

2) використання одиниць СГС та гаусової системи обумовлено зручністю їх використання в магнітному розділі;

3) кути φ_{uH} та φ_A при побудові графіків задаються як константи, причому якщо поле може міняти свій кут φ_{uH} при кожній новій побудові (тобто може бути направлено під довільним кутом до осі анізотроопії верхнього шару), то кут φ_A залишається сталим, оскільки це технологічний параметр (типове його значення $\varphi_A = \pi/8$).

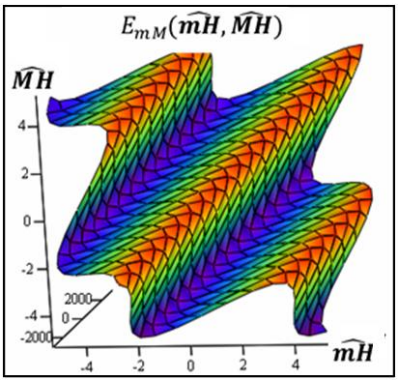


Рис.8. 3*D* графік енергії магнітостатичної взаємодії намагніченостей двух феромагнітних шарів

2. Енергія векторів намагніченості $\vec{m}$ та $\vec{M}$ у зовнішньому прикладеному полі $\vec{H}$, яке становить кут φ_{uH} із віссю анізотропії верхнього шару і кут ($\varphi_{uH} + \varphi_A$) із віссю анізотропії нижнього дорівнює:

$$E_H(\varphi_{mH}, \varphi_{MH}) = -m \cdot H \cdot \cos(\varphi_{mH}) - M \cdot H \cdot \cos(\varphi_{MH}) \qquad (6)$$

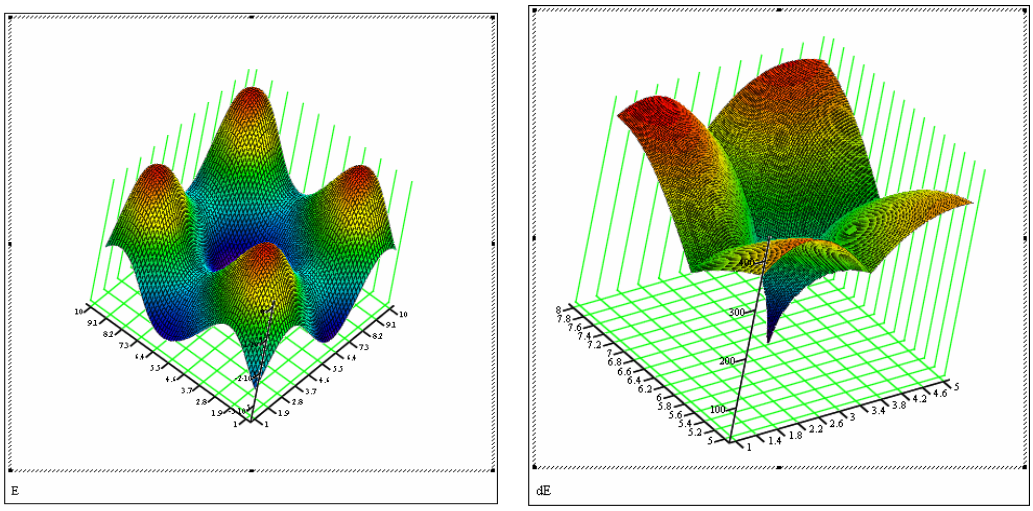
3. Магнітостатична (взаємна) енергія векторів намагніченості $\vec{m}$ - верхнього і $\vec{M}$ - нижнього шарів в полях розсіювання один одного:

$$E_{mM}(\varphi_m, \varphi_M) = k_{mM} \cdot m \cdot M \cdot \cos(\varphi_M - \varphi_m) \qquad (7)$$

де коефіцієнт k_{mM} характеризує ступінь взаємодії намагніченостей ***m*** і ***M***, пропорційної інтенсивності полів розсіювання обох намагніченостей та відстані між ними (характерне значення цього параметра k_{mM} =0,05 – при моделюванні бути змінено для дослідження, наприклад, впливу шорсткості поверхні на взаємодію намагніченостей шарів).

З графіка (рис.8) можна визначити, що при протилежно направлених векторах намагніченості енергія взаємодії мінімальна і навпаки, при паралельних векторах – максимальна.

Прим. Крім цих трьох енергій, важливу роль відіграють також обмінна, магнітострикційна, коерцитивна енергії, вони можуть бути враховані додатково.



а *б*

Рис.9. Залежність повної енергії намагнічування (*а*) та її диференціалу (*б*) від кутів φ_m (вісь X) і φ_M (вісь Y) векторів намагніченості шарів із напрямком прикладеного поля ***H***.

Прим. Енергія всюди розраховується в системі СГС в ерг/см^3.

4. Результуючі тривимірні залежності енергії *E* від азимутальних напрямків векторів намагніченості двох шарів (енергетичні діаграми) розраховувалась за формулою:

$$E\,(\varphi_{mH},\varphi_{MH}) = E_u(\varphi_{mH}) + E_u\,(\varphi_{MH}) + E_H\,(\varphi_{mH},\varphi_{MH}) + E_{mM}(\varphi_{mH},\varphi_{MH}) \quad (8)$$

і з рівняння повного диференціалу сумарної енергії E_Σ для більш точного визначення координат точок екстремумів:

$$dE_\Sigma\,(\varphi_{mH},\,\varphi_{MH}) = \sqrt{\left|\frac{dE_\Sigma}{d\varphi_{mH}}\right| + \left|\frac{dE_\Sigma}{d\varphi_{MH}}\right|} \quad (9)$$

3.1. Завдання для побудови петель магнітного гістерезису зв'язаних наношарів.

Розглядаємо тонкоплівкову шарувату структуру Fe/Cu/Fe наступними значеннями констант: модулі векторів намагніченості вільного (верхнього) та зв'язаного (нижнього) шарів відповідно ***m****=1700Гс,* ***M****=1700Гс, величина напруженості магнітного поля H, що прикладається від -50 E до 0 і від 0 до +50 E, константа одноосної анізотропії* $K_u=10^4$ *ерг/см*^{3}*, азимутальний кут прикладеного поля* ***H*** *(нульовий напрямок шкали) з віссю анізотропії магнітом'якого шару можна вибрати будь-який, тобто довільний, кут між осями анізотропії магнітних шарів був заданий в тексті, але можна вибрати і довільний в діапазоні від 15 до 30 градусів (задається в радіанах). Для заданих параметрів досліджуваної шаруватої магнітної системи (т.зв. «спіновий клапан»!) необхідно побудовати графічні залежності складових енергій, повної магнітної енергії і її диференціалу в програмі MathCad за вищенаведеними формулами, подібно до наведених у тексті в якості прикладів.*

При виконанні завдання необхідно також оцінити характерні параметри цього процесу (поля насичення, коерцитивості, коеф. прямокутності петлі гістерезису тощо).

Є тонкоплівкова шарувата структура типу «спінового клапана», що складається з двох основних феромагнітних (ФМ) наношарів заліза (Fe), розділених немагнітним прошарком, у якості якого може бути як металева провідна мідь (Cu), так і діелектричні прошарки з оксидів алюм. Al_2O_3 *або магнію MgO. У випадку діелектричного прошарку спіновий клапан (що має назву MTJ - magnetic tunnel junction) має дуже високий ел. опір, тому працює в режимі тунельних струмів (величиною порядка одиниць мкА). Інший тип спінових клапанів - повністю металевих (напр., Fe/Cu/Fe), тобто із метале-*

вим типом провідності, - мають дуже малий електричний опір, який, втім, змінюється при зміні відносної орієнтації намагніченостей шарів.

На цьому принципі працюють магніторезистивні головки зчитування інформації комп'ютерних жорстких дисків і розробляються нові функціональні елементи спінової електроніки. Характер перемагнічування таких структур, зокрема під дією прикладеного магнітного поля, є важливою характеристикою спінового клапану, що може досліджуватись як експериментально (напр., магнітооптично), так і теоретично (напр., на основі розрахункової моделі Стонера-Вольфарта).

*Задача комп'ютерного моделювання перемагнічування сендвіч-структури полягає у записі сумарної (повної) енергії намагніченості E як функції прикладеного зовнішнього магнітного поля **H** і кутів φ_m та φ_M орієнтації векторів намагніченості **m** та **M** двох основних феромагнітних шарів відносно напрямку прикладеного поля **H**.*

Повна енергія складатиметься із суми наступних енергій:

*1) енергії одноосної магнітної анізотропії в обох шарах, яка визначається добутком константи анізотропії (типове значення для Fe: $K_u=10^4$ ерг/см^3) та квадрата косинуса азимутального кута (у площині тонкого шару). Напрямки легких осей відрізняються приблизно на $\pi/8$ через технологічні особливості напилення шарів, а поле може прикладатись у площині плівки у будь-якому азимутальному напрямку, який треба задати відповідним кутом між вектором напруженості магнітного поля **H** та легкою віссю одного з шарів;*

*2) магнітостатичної енергії взаємодії векторів намагніченості шарів з прикладеним полем, яка дорівнює добутку відповідної намагніченості (для Fe **m**=**M**=1700 Гс) та косинуса кута між відповідними векторами (**m** та **H** або **M** та **H**). Причому енергія мінімальна при паралельних, а максимальна при антипаралельних векторах;*

*3) магнітостатичної енергії взаємодії векторів намагніченості шарів між собою, яка також визначається добутком намагніченостей на коефіцієнт взаємозв'язку (характерні значення k_m~0,01÷0,05) та на косинус кута між цими векторами. (кут між векторами **m** та **M** краще позначати як різницю кутів між відповідними векторами намагніченості з полем **H**). У цьому випадку енергія буде мінімальною при антипаралельних **m** та **M** і максимальною – при паралельних.*

*Мінімум сумарної енергії E_Σ як функції двох змінних φ_m та φ_M визначатиме кутові положення векторів **m** та **M** відносно напрямку прикладеного поля **H** при даному його значенні. Функція кореня квадратного з модуля*

повного диференціалу залежності $E_\Sigma(\varphi_m, \varphi_M)$ буде торкатись площини нульового потенціалу в точках естремума функції E_Σ. Т. ч., можна точно визначити координати X та Y – тобто кути φ_m та φ_M, під якими орієнтуються вектора намагніченості ***m*** *та* ***M*** *до напрямку прикладеного поля.*

Косинуси кутів φ_m та φ_M пропорційні проекції відповідного вектора намагніченості на напрямок поля ***H****, таким чином можуть бути побудовані по точках криві намагнічування - петлі гістерезису, тобто залежності* $\boldsymbol{m_H(H)}$ *та* $\boldsymbol{M_H(H)}$ *для різних (хоча б одну залежність для одного значення кута поля з віссю анізотропії!) вибраних значень кута напрямку прикладеного поля* ***H*** *відносно осей анізотропії шарів.*

Таким чином, остаточним завданням всієї задачі є побудова кривої намагнічування (достатньо в один бік, від - $|\boldsymbol{H}_{max}|$ *до +* $\boldsymbol{H}_{max}$ *(* $|\boldsymbol{H}max| \approx 50E$*, в інший бік петля гістерезису відображається простим поворотом на 180° і додаванням повернутої кривої до початкової).*

4. Моделювання перемагнічування об'ємного кристалу.

Отже, принцип моделювання перемагнічування на основі моделі Стонера-Вольфарта полягає у запису різних типів енергії намагніченості і знаходженні мінімуму сумарної енергії. Положення вектора(ів) намагніченості, при якому за визначених умов повна енергія має мінімум, є рівноважним, стійким. Проекція вектора намагніченості на вибраний напрямок (наприклад, напрямок прикладеного зовнішнього поля) є намагніченістю матеріалу в заданому напрямку, що може змінюватись при зміні напруженості поля, а також інших ряду інших характеристик, як наприклад, величини наведеної анізотропії і т.д. Залежність величини проекції вектора намагніченості на напрямок прикладеного поля від напруженості цього поля є кривою намагнічування (перемагнічування) або т.зв. петлею магнітного гістерезису, яка є основною магнітною характеристикою магнітного матеріалу і яку т.ч. можна змоделювати для будь-яких характеристик речовини, що можуть бути задані за умовою.

У продовження попереднього розгляду типів енергії намагніченості необхідно відзначити ще кілька можливих типів такої енергії.

1. **Енергія деформації** (магнітопружня). Відомо, що в результаті лінійної механічної деформації відбувається скорочення розмірів тіла в напрямку стискання і збільшення цих розмірів в перпендикулярному напрямку і навпаки, при розтягуванні відбувається розширення тіла в напрямку дії механічного напруження, тобто відстань між його атомами (іонами)

збільшується, а в перпендикулярному напрямку – зменшується. Така зміна відстані між атомами (іонами) призводить до зміни характеру магнітної взаємодії, а отже, з'являється додаткова наведена анізотропія, яку можна врахувати подібно до ростової анізотропії, описаної в п.1 1-ї Лекції. Кутова залежність наведеної деформаційної анізотропії буде також пропорційною квадрату косинусу азимутального кута (мається на увазі деформація в площині плівки, хоча, наприклад, деформація вигину призводить до аналогічних результатів). Але відмінність від ростової 1-осної анізотропії полягає в тому, що при зміні полярності прикладеного напруження, зміна напрямку осі анізотропії відбувається під кутом 90°, що і необхідно врахувати у відповідній формулі для енергії магнітопружньої анізотропії.

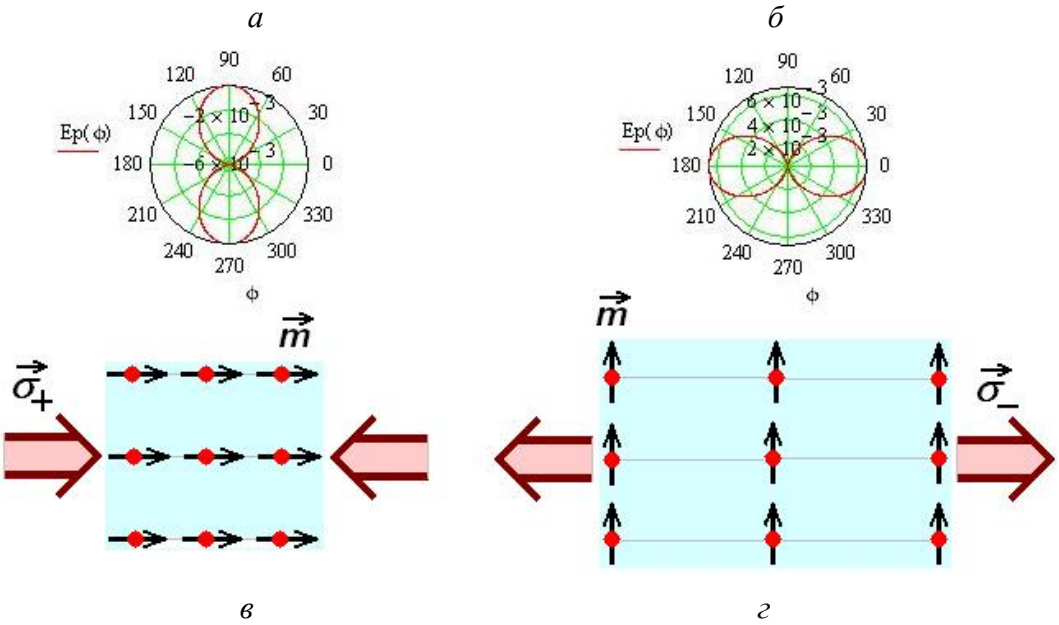


Рис.10. Полярні діаграми 1-осної анізотропії, наведеної механічною деформацією вздовж напрямку 0-го кута для $\sigma_+ > 0$ (*а, в*) та $\sigma_- < 0$ (*б, г*) і схематичне зображення впливу тиску на орієнтацію магнітних моментів (*в, г*).

Один із варіантів запису формули для такої магнітної енергії механічної деформації наступний:

$$Ep(\varphi) = -\frac{2}{3} \cdot \lambda \cdot \sigma \cdot \cos^2\varphi \ , \qquad (10)$$

де λ - магнітопружня константа ізотропного матеріалу; σ - величина прикладеного механічного напруження; φ - азимутальний кут між напрямком спо-

стереження і напрямком прикладеної сили. Якщо остання змінює свій знак, тобто замість стискання відбувається розтягування в тому самому напрямку, то графік одразу змінює напрямок своєї легкої осі (рис.), а глибина потенціальної ями E_p, пов'язаної із цією віссю залежатиме від абсолютної величини прикладеного механічного напруження σ.

Схематично пояснити явище 90-градусного перемагнічування можна на прикладі діаграми на рис.10*в,г*: зменшення відстані між магнітними атомами (іонами) призводить до посилення обмінної взаємодії, в результаті чого енергетично вигіднішим буде розташування магнітних моментів $\vec{m}$ вздовж напрямку напруження і навпаки, при розтягуванні кристалічної гратки вигіднішим положенням може стати поперечне до напруження. Реальну ж ситуацію не можна розглядати настільки спрощено, оскільки окрім обмінної, необхідно враховувати ще багато інших факторів атомарної взаємодії. Тим не менше, таке представлення дає первісне уявлення про причини такої перпендикулярної переорієнтації магнітних моментів атомів.

Для наочної ілюстрації впливу механічної деформації на магнітні властивості матеріалу, на рис. зображені петлі магнітного гістерезису для залізоітрієвого граната при різних тисках різної полярності. Форма петлі може змінюватись від близької до лінійної до майже ступеневої функції. Таким чином може, наприклад, вибиратись необхідна робоча характеристика магнітного елемента (датчика) в залежності від його призначення.

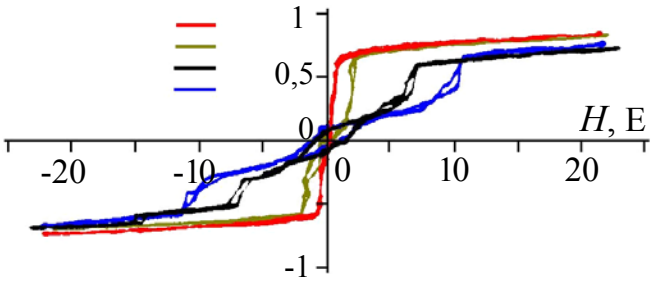


Рис.11. Криві перемагнічування структури ЗІГ/п'єзоелектрик при різних напругах на п'єзопластині (тобто різних деформаціях): а) U=-130В (синя); б) U=0В (чорна); в) U=+74В (жовта); г) U=+130В (червона).

2. **Енергія, обумовлена коерцитивністю матеріала**.

Врахування коерцитивності дає можливість більш точно визначити напруженості зовнішніх полів, при яких відбувається поворот векторів намаг-

ніченості локальних областей (доменів) або синхронно всіх атомарних магнітних моментів. Енергію анізотропії можна розділити на 2 складові: 1) стала, тобто постійна складова, яка обумовлена т.зв. «магнітною в'язкістю» і періодично змінна величина, пов'язана із магнітною неоднорідністю матеріалу. Період змін звичайно не є сталим, оскільки огинаюча потенційного рельєфа неперервно змінюється як по просторовому періоду, так і по амплітуді, але для наближених оцінок може бути прийнято середнє значення періоду і амплітуди «коерцитивного» потенціалу. Величина останнього визначається експериментально в Ерстедах, а в розрахунках використовуються питомі енергетичні одиниці (ерг/см^3). Між собою вони пов'язуються через намагніченість (для *Fe* величина M_s=1700 Гс). Таким чином, вважатимемо, що полю в 1 Е (1 Ерстед) приблизно відповідатиме магнітна енергія в 1700 ерг/см^3.

Т. ч., енергію, обумовлену коерцитивністю, можна записати як:

$$E_k = C_0 + C_k \cdot \cos\left(\frac{2\pi\varphi}{T_k}\right), \tag{11}$$

де C_0 та C_k – коефіцієнти, які характеризують відповідні додаткові енергії, необхідні для подолання коерцитивності, T_k – характерний (середній) період енергетичних неоднорідностей (головним чином через наявність домішок). Для низькокоерцитивних матеріалів можна прийняти, що типові значення згаданих параметрів C_0 та C_k знаходяться в діапазоні до $\sim 10^3$ ерг/см^3, а період $T_k \sim 0{,}1$ см.

3. **Енергія обмінної взаємодії**.

Обмінна енергії сусідніх доменів, так само, як і одна з попередніх - магнітостатична, - залежить від кута за законом косинуса, але тут вже мінімум енергії буде при паралельних орієнтаціях намагніченостей і максимум – при їх протинаправленості. Ця енергія може іноді мінятись стрибкоподібно при намагнічуванні через різні об'єми різних фаз намагніченостей (доменів), що необхідно враховувати у випадках неоднорідної намагніченості матеріалу додатково до класичної моделі Стонера-Вольфарта, оскільки в ній розгляд процесів перемагнічування проводився тільки в припущенні однорідної намагніченості усього досліджуваного об'єму. Але це вже виходить за рамки класичної моделі Стонера-Вольфарта, оскільки є доповненням і розширенням цієї моделі на неоднорідно-намагнічені речовини.

Формулу для обмінної енергії можна записати подібно до взаємної енергії, або енергії взаємодії намагніченостей феромагнітних шарів, що згадувалась вище:

$$E_{\text{o}}(\varphi_m, \varphi_M) = J_{\text{o}} \cdot m \cdot M \cdot \cos(\varphi_M - \varphi_m) \tag{12}$$

де J_o - константа обмінної взаємодії. Втім, для моделювання однорідного перемагнічування цю енергію можна вважати сталою і в першому наближенні незмінною.

4.1. Особливості перемагнічування анізотропного об'ємного кристалу.

Під анізотропним кристалом будемо мати на увазі кристал із магнітною кристалографічною анізотропією. Магнітною анізотропією, в свою чергу, є залежність магнітних властивостей (намагніченості, магнітної сприйнятливості та ін.) магнетика від напрямку в об'ємі кристала. Природа магнітної анізотропії полягає в залежності взаємодії атомів або іонів в речовині від орієнтації їх магнітних моментів. Така міжатомна магнітна взаємодія залежить від типу та розташування сусідніх атомів (іонів), причому анізотропія може бути обумовлена як природними факторами (тобто, наприклад, структурою кристалічної гратки), так і бути наслідком зовнішнього впливу (напр., механічної деформації, яка змінює відстані між вузлами кристалічної гратки, а отже впливає на взаємодію вузлів цієї гратки).

Магнітна анізотропія впливає на процеси намагнічування, магнітну доменну структуру та інші властивості магнетиків. В монокристалічних феромагнетиках вона проявляється в наявності осей легкого намагнічування, уздовж яких звичайно орієнтуються вектори спонтанної намагніченості феромагнітних доменів. Мірою магнітної анізотропії для даного кристалографічного напрямку є різниця енергій, необхідних для намагнічування одиниці об'єму зразка вздовж важкого і легкого напрямків намагнічування.

Одним із простих і поширених типів магнітної анізотропії є кубічна анізотропія, характерна для кристалів кубічної симетрії. До таких кристалів відносяться, зокрема феримагнітний залізо-ітрієвий гранат (ЗІГ) хімічного складу $Y_3Fe_5O_{12}$, який часто використовується в якості об'єкта магнітооптичних досліджень через його високу магнітооптичну якість.

Основна анізотропія кристалічних плівок ЗІГ є кубічною; часом може виникати і одноосна компонента анізотропії, причому як в процесі технологічного вирощування, так і в уже готових плівках. В першому випадку анізотропія є наслідком регулювання складу та кількості домішок, в результаті якого може виникати механічне напруження гратки внаслідок невідповідності розмірних параметрів кристалічних граток матеріалів плівки та підкладинки. Це призводить до утворення особливого напрямку, вздовж якого зміни енергії магнітної кристалографічної анізотропії найбільше відображаються на стані вектора намагніченості. Другий випадок відрізняється тим, що

механічні напруження можуть створюватись штучно, наприклад, шляхом деформації плівки.

Плівкові структури кристалічного ЗІГ із типовими товщинами плівок – від 1 до 10 мкм, вирощуються переважно епітаксійним методом; площина, в якій вирощується плівка, може бути різною (в залежності від площини, в якій вирізається підкладинка з галій-гадолінієвого гранату - $Gd_3Ga_5O_{12}$), але найчастіше такими площинами є основні площини кубічного кристалу – (100), (110), (111). Саме в цих площинах і будемо розглядати далі процеси перемагнічування і їх моделювання комп'ютерними методами.

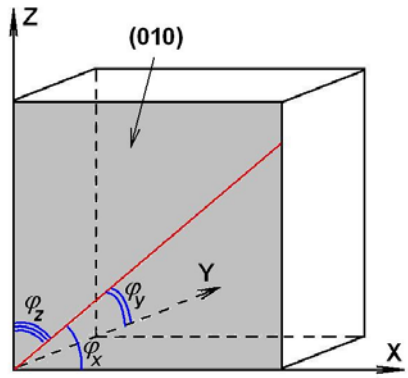


Рис.12. Орієнтація площини (010) в кубічному кристалі з направляючими кутами φ_x , φ_y, φ_z.

2. Отже, площиною (100), або (010), або (001) (ці площини рівноцінні) є площина грані куба (виділена сірим), в якій червоною лінією на рис.12 позначений деякий напрямок в цій площині. Якщо перемагнічування (тобто переорієнтація вектора намагніченості) відбувається тільки в цій площині, то становить інтерес визначення магнітної анізотропії саме в цій площині, оскільки це є енергетичною характеристикою магнітного стану кристалу.

Енергія анізотропії кубічного кристалу визначається за відомою загальною формулою:

$$E_a = K_1 \cdot \left(\cos^2\varphi_x \cdot \cos^2\varphi_y + \cos^2\varphi_x \cdot \cos^2\varphi_z + \cos^2\varphi_y \cdot \cos^2\varphi_z\right) + \\ + K_2 \cdot \left(\cos^2\varphi_x \cdot \cos^2\varphi_y \cdot \cos^2\varphi_z\right), \qquad (13)$$

де K_1 і K_2 – відповідно перша та друга константи кубічної анізотропії (для вибраної речовини ЗІГ K_1=-6100 ерг/см^3; K_2=-50 ерг/см^3); $\cos^2\varphi_x$, $\cos^2\varphi_y$, $\cos^2\varphi_z$ - квадрати направляючих косинусів вибраного напрямку в площині (010) (червона лінія), тобто φ_x, φ_y, φ_z - кути між даним довільно вибраним змінним напрямком в площині (010) і відповідними осями декартових координат.

Для визначення залежності енергії анізотропії від напрямку в площині (010), тобто від кута в цій площині, позначеного на рис.1 як φ_x або просто φ,

необхідно в формулі (1) врахувати, що кут φ_y=90°=$\pi/2$ незалежно від значення кута φ, а кут $\varphi_z=\pi/2-\varphi_x$, а отже, $\cos\varphi_z=\sin\varphi_x$.

Таким чином, вираз (13) для площини (100) або (010) значно спрощується: ${}^{(100)}E_a = K_1 \cdot \cos^2\varphi \cdot \sin^2\varphi$, і графік залежності ${}^{(100)}E_a(\varphi)$ достатньо побудувати в межах зміни кута від 0 до 90° (оскільки далі залежність буде періодично повторюватись). Приклад графіка такої залежності, побудованого в програмі *Mathcad* в декартових (*а*) або полярних (*б*) координатах зображений на рис.2 (*зрозуміло, що побудувати його можна і в будь-якій іншій програмі, яка може будувати графіки!*). З цього графіка видно, що напрямок ребра куба (напр., **OE**, **OB** на рис.3*а*) є напрямком важкого намагнічування і енергія намагніченості вздовж цього напрямку максимальна (вона дорівнює ${}^{<100>}E_a$=0, оскільки відлік енергії іде у від'ємний бік, як в звичайній потенційній ямі). Напрямок <110> під кутом 45° до <100> є напрямком найлегшого намагнічування в цій площині (100) або (010) (що те саме) і енергія анізотропії в цьому напрямку дорівнює ${}^{<110>}E_a$=-1525 ерг/см^3.

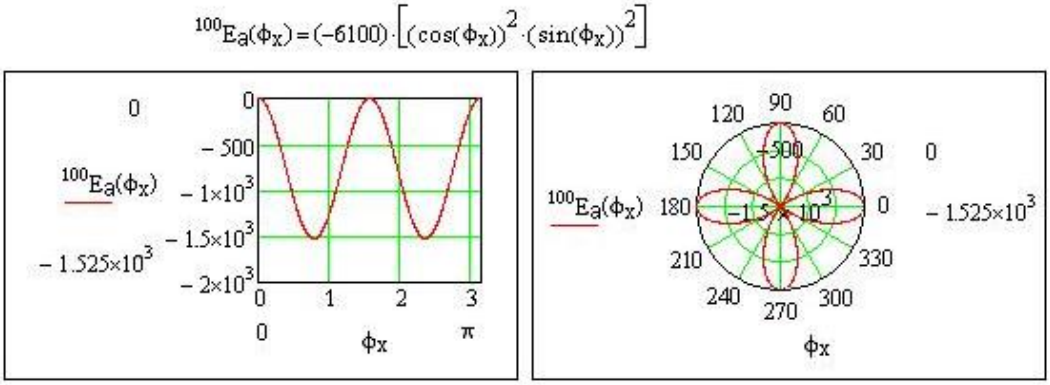


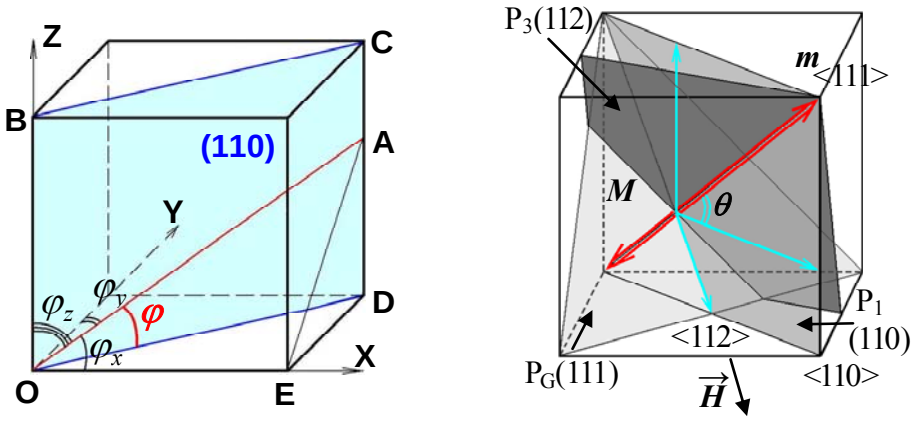
Рис.13. Залежність ${}^{(100)}E_a(\varphi)$ в декартових (*а*) та полярних (*б*) координатах.

4.2. Завдання для моделювання п'єзоперемагнічування об'ємного кристалу.

Необхідно у першу чергу побудувати побудувати графік залежності енергії магнітної анізотропії в площині (110), тобто визначити функціональну залежність енергії анізотропії ${}^{110}E_a$ *від однієї змінної* φ *- кута між діагональю грані куба (напрямок <110>, зображений синім кольором на рис.3а) і будь-яким напрямком в площині (110), позначеним червоним відрі-*

зком. Зроботи це можна подібно до описаної вище методики побудови залежності ${}^{(100)}E_a(\varphi)$ *(див.* ***Прим****. нижче).*

Прим. Для побудови такої залежності необхідно скористатись формулою (1), попередньо зв'язавши косинуси направляючих кутів із косинусом кута φ в площині (110). Зв'язати їх легко із геометричної побудови: кут φ_z напрямку **OA** із віссю **Z** в сумі з кутом φ становить 90°, а однакові косинуси кутів φ_x та φ_y напрямку **OA** з осями **X** та **Y** нескладно зв'язати з кутом φ через спільну діагональ **OA** трикутників **OAD** та **OAE** і відомі співвідношення між сторонами (ребрами) куба та діагоналями його граней.



а *б*

Рис.14. Розташування площини (110) в кубічному кристалі (*а*) та площин (111) і (112) (*б*).

4. Для оцінки величини кубічної анізотропії в площині (111) можна використовувати декартову систему координат, що дозволяє розрахувати точно азимутальну залежність енергії не тільки по першій, але і по другій константі анізотропії (по першій константі анізотропія в площині (111) виявляється незмінною):

$$
{}^{(111)}E_A = \frac{K_1}{4} + K_2 \cdot \left[\frac{1}{6} - \frac{\sin^2\varphi}{2.25} + \frac{\sin^4\varphi}{3.37}\right] \cdot \left[\frac{0.75}{\sin^2(0.67\pi - \varphi)} - \right.
$$
$$
\left. - \left(1 - \frac{\sin\varphi}{\sin(0.67\pi - \varphi)}\right)^2\right]^2 \cdot \sin^2\left(\frac{2\pi}{3} - \varphi\right) \qquad (14)
$$

Полярну 2D діаграму залежності енергії анізотропії $^{(111)}\boldsymbol{E_a}$ *від азимутального кута* φ *в цій площині (111) у відповідності із цією формулою можна побудувати самостійно.*

5. Для розрахунків просторового розподілу енергії анізотропії кристалічних плівок, вирощених в площині (111) простіше використовувати формулу в сферичній системі координат:

$$E_a = -1334.37 - 444.8 \cdot \cos(4 \cdot \theta) - 254.17 \cdot \cos(2 \cdot \theta) - \\ - 718.8 \cdot (\sin(2 \cdot \theta) - 0{,}5 \cdot \sin(4 \cdot \theta)) \cdot \cos(3 \cdot \varphi) \qquad (15)$$

- тут чисельно записані всі необхідні коефіцієнти, кут φ є азимутальним кутом в площині (111), а кут θ є полярним кутом (тобто кутом нахилу заданого напрямку до вертикальної осі **Z** полярної системи координат).
Побудувати такий 3D (тобто 3-вимірний) графік можна як в полярних координатах системі, так і на декартовій координатній діаграмі (в такому випадку він дещо викривлюється приблизна так же, як і глобус, зображений на плоскій карті).

4.3. Моделювання на основі принципів стрейнтроніки: п'єзоперемагнічування шаруватих сендвіч структур із наношарів і об'ємної кристалічної плівки.

Стрейнтроніка – розділ спінтроніки, що досліджує перемагнічування речовин під дією механічних напружень. На основі магнітопружних та магнітострикційних ефектів (це взаємно-обернені явища) створюються функціональні вузли для різних типів магнітоелектронних пристроїв, в першу чергу датчиків магнітного поля і п'єзомагнітних регістрів схем комп'ютерної логіки тощо.

Для ефективного перемагнічування використовують шаруваті структури, що складаються із жорство зв'язаних п'єзоелектричного (напр., т.зв. PZT – цирконій-титанат свинцю) і ферромагнітного шарів (напр., ЗІГ – діелектричний залізо-ітрієвий гранат - $Y_3Fe_5O_{12}$). В таких структурах механічна деформація дозволяє зменшити магнітне поле, необхідне для локального або повного перемагнічування (зміни магнітного стану), або навіть здійснювати повністю п'єзомеханічне перемагнічування завдяки направленому наведенню одноосної анізотропії при деформації. Такий спосіб дозволяє здійснювати перемагнічування в локальній нанорозмірній області із меншими витратами енергії. Особливістю ферит-п'єзоелектричної структури є діелектричні властивості шару ЗІГ, тому вона непридатна для застосування в умовах, де необхідне пропускання струму через таку структуру.

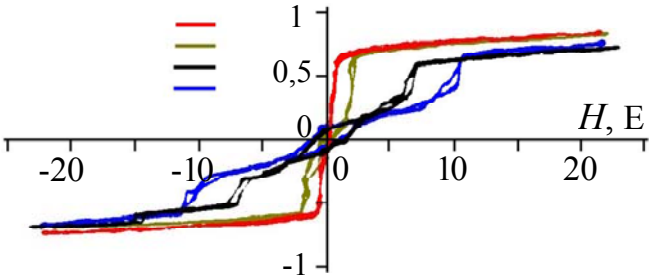
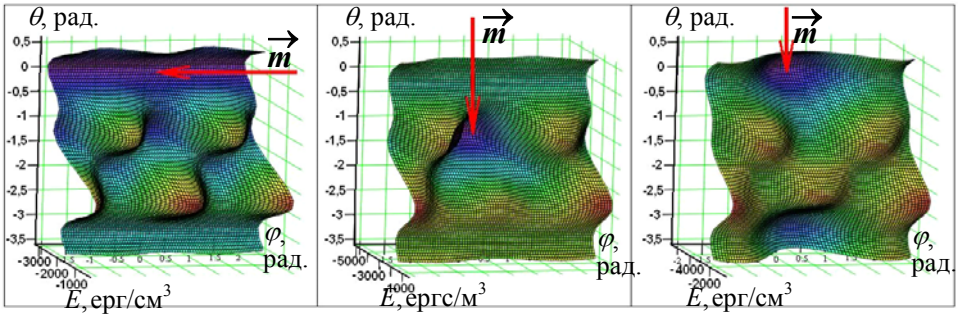


Рис.15. Криві перемагнічування структури ЗІГ/п'єзоелектрик при різних напругах на п'єзопластині: а) U=-130 В (синя); б) U=0 В (чорна); в) U=+74 В (жовта); г) U=+130 В (червона).

Сенсори на основі композитних шаруватих структур.

Сенсори магнітних та електромагнітних полів можуть бути створені на основі структур із ферита, що контактує із п'єзоелектриком. Принцип їх роботи оснований на зміні орієнтації вектора намагнічености феромагнетика. Відмінністю від традиційних сенсорів є використання додаткового п'єзоелектричного шару, що жорстко механічно зв'язаний із ферромагнітним шаром. Прикладання електричної напруги до п'єзоелектрика дозволяє створювати у ферромагнетику механічні напруження, що можуть змінювати магнітну анізотропію, створюючи наведену вісь легкого чи важкого намагнічування в залежності від напрямку деформації, яка визначається полярністю напруги. Зміною напряму механічного напруження можна впливати на стан намагніченості і змінювати енергію перемагнічування, а отже, і характеристики багатофункціонального інтегрального датчика магнітного поля. Дослідження характеристик експериментальних магніто-, деформаційно- та світлочутливих зразків на основі плівок ітрієвого ферит-гранату дає можливість розробити принципи функціонування магнітопружних сенсорів та створити датчики із регульованими характеристиками.

Прикладання електричної напруги до металізованих контактів на п'єзоелектрику цирконату-титанату свинцю змінювало форму петель магнітного гістерезису плівки ЗІГ, жорстко зв'язаної із п'єзоелектриком, наприклад, як це представлено на рис.2. Таким чином можливо формувати ха-



а б в

Рис.16. Діаграми енергії намагніченості для вектора намагніченості одного напрямку: а) без механічної деформації; б) зі стисненням при U=130В; в) із розтягуванням при U= -130В.

Червоні стрілки показують потенційні ями, в яких (тобто в такому просторовому напрямку) розташовуються вектори намагніченості доменів феримагнітної плівки через мінімальну енергію такого стану.

рактеристику датчика – функціонального елемента спінтроніки (стрейнтроніки) для роботи в режимах від дискретного перемикання до аналогового вимірювання напруженості магнітного поля.

П'єзоперемагнічування об'ємної кристалічної плівки.

Як видно з рис.3, форма петель магнітного гістерезису плівки ЗІГ суттєво змінюється при її деформації. Під дією напруги однієї полярності крива намагнічування, у порівнянні із початковою (при $U=0$ В, рис.3*б*) витягується в похилу пряму (рис.3*а*) тим сильніше, чим більша напруга, а при іншій полярності напруги – навпаки, збільшує крутизну (рис.3*в*), приймаючи вигляд сходинкової функції (рис.3*г*) при максимальних напругах.

Спостереження вигляду доменних структур при таких змінах і відповідних їм спектрів дифракції поляризованого оптичного випромінювання дало наступні зображення (рис.17), що розміщені у відповідних точках кривих намагнічування.

З фізичної точки зору зміну форми петель гістерезису можна пояснити наведенням 1-осної анізотропії вздовж різних (перпендикулярних) осей в площині росту плівки (111) і перпендикулярно до цієї площини, в залежності від стискання чи розтягування п'єзоелектрика під дією електричної напруги і відповідної деформації жорстко зв'язаної з ним плівки ЗІГ.

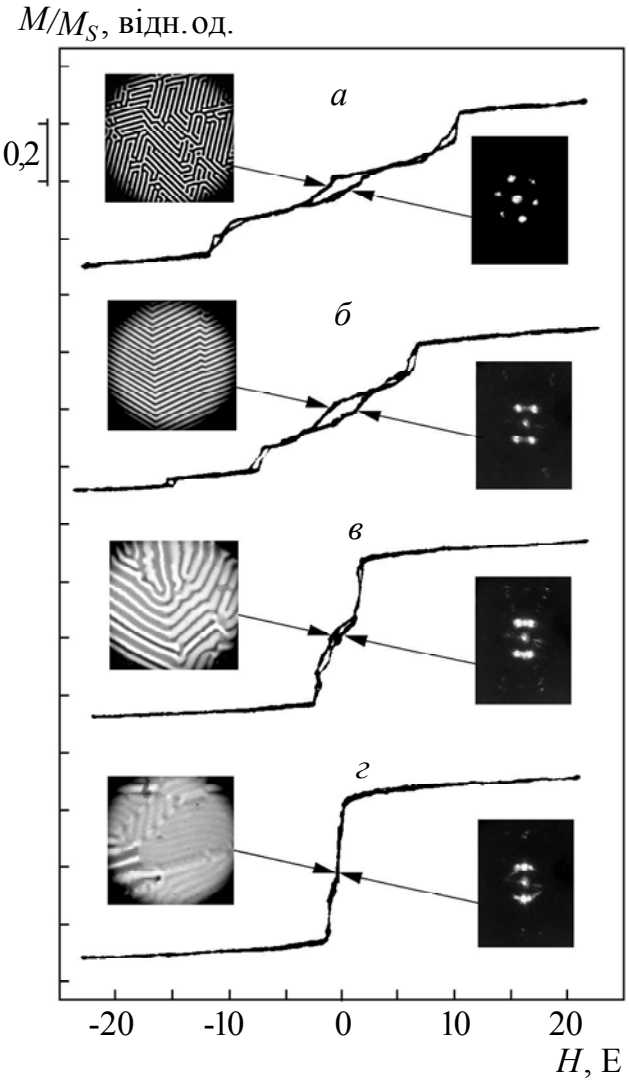


Рис.17. Криві перемагнічування сендвіч-структури ЗІГ/п'єзоелектрик при різних напругах U на п'єзопластині та відповідні їм доменні структури і спектри дифракції випромінювання при відсутності зовнішнього магнітного поля: *а*) U=-130 В ; *б*) U=0 В ; *в*) U=+74 В ; *г*) U=+130 В.

На кристалічному (іонному) рівнях при механічному розтягуванні шару плівки магнітні іони віддаляються один від одного і обмінна взаємодія між ними слабкішає. Відносне збільшення впливу магнітостатичної енергії

призводить до збільшення кількості доменів і доменних границь, тобто до зменшення періоду доменів. При механічному стисканні іони сближуються і енергія обміну збільшується. При цьому більш енергетично вигідним стає послідовне розташування магнітних моментів із мінімальною енергією розмагнічування, тобто намагніченість набуває тенденцію до поступової переорієнтації у ростову площину плівки. Домени при цьому розширюються, а спектр дифракції відповідно звужується (рис. 4*в*,*г*).

При перемагнічуванні плівки магнітним полем і одночасному прикладанні механічних напружень спостерігається зміна форми петлі гістерезису, зокрема, на більш витягнуту при розтягнутому шарі плівки. Це є наслідком відзначеного раніше наведення перпендикулярної анізотропії, подолання якої вимагає прикладання більших полів для перемагнічування плівки у перпендикулярному до площини плівки напрямку. Зміна ж форми петлі гістерезису на більш круту, близьку до вузької прямокутної, майже ступеневої обумовлена малістю полів розмагнічування в площині плівки, що дозволяє здійснювати перемагнічування мінімальними полями.

Для кількісного опису наведеної вище трансформації форми петель гістерезису можна використати рівняння енергетичного балансу на основі моделі Стонера-Вольфарта із врахуванням неоднорідностей намагніченості та наведеної анізотропії, що виникає при механічній деформації кристалічної структури ЗІГ.

Моделювання перемагнічування при механічних деформаціях здійснювалось на основі моделі Стонера-Вольфарта, розширеної за рахунок додаткової енергії прикладеного п'єзонапруження $E_U=f(U_P)$, яка в залежності від електричної напруги U_P на п'єзоелектрику, оцінювалась за косинус-квадратним співвідношенням, яке враховувало зміну напрямку наведеної одноосної анізотропії при механічній деформації стискання чи розтягування:

$$E_U(\varphi,\theta) = k_U \cdot U_P \cdot \left[\cos^2\theta - \frac{|U_P|}{2 \cdot U_P} - \frac{U_P}{2 \cdot U_P} \right] \cdot \cos^2(\varphi - \pi/2) \cdot \qquad (16)$$

Мінімізація сумарної питомої енергії намагніченості дозволяє визначати азимутальний φ та полярний θ кути орієнтації намагніченості, послідовність яких при зміні прикладеного магнітного поля H утворює петлі гістерезису, форми яких з достатньою точністю співпадають із експериментальними. Це дає змогу пояснити як фізичні процеси, що відбуваються при деформації, так і особливості кривих з метою адаптації властивостей функціональних елементів для заданих умов експлуатації.

Приклади енергетичних діаграм для різних значень прикладеного поля, змодельованих відповідно до наведеної вище формули, подано на рис.18.

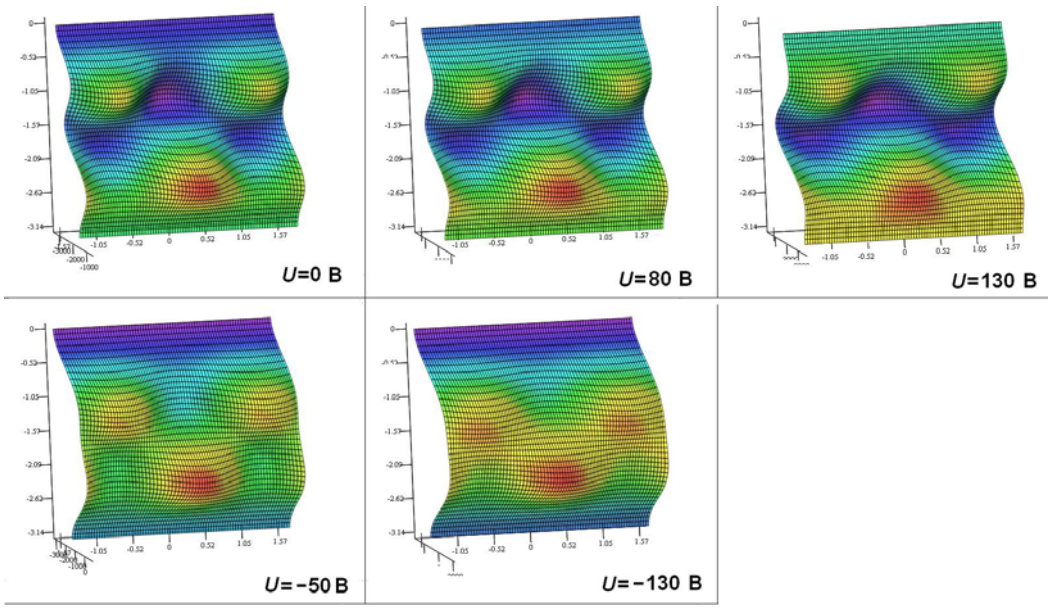


Рис. 18. Діаграми сумарної енергії намагнічування при різних величинах прикладеного поля та механічних напружень.

Із представлених діаграм видно, що при прикладанні додатньої напруги $U = 130$ В утворюється глибока потенційна яма в напрямку осі <112> в площині (111) плівки ЗІГ. В цій ямі врешті і опиняються вектори намагніченості обох доменних напрямків. При прикладанні від'ємної напруги потенційна яма для вектора $\vec{m}$ поглиблюється у тім місці, де він початково знаходився, тому доменна структура ЗІГ зберігає свою «паркетну» форму, зменшуючи період доменів через зміну енергії анізотропії, как вже зазначалось вище.

Таким чином, чутливість до деформації змінюється при зміні напрямку деформації плівки як із зовнішнім магнітним полем, так і без нього.

Перемагнічування композитних наноструктур із металевими магнітними шарами та п'єзоелектриком під дією механічного напруження.

Структури із металевими наношарами мають високу (металеву) провідність навіть при товщинах шарів в одиниці нанометрів. Механічна деформація таких структур також спричиняє наведення в них одноосної анізотропії і відповідно може призводити до зміни магнітного стану (напрямку намагніченості) одного (магнітом'якого) або обох магнітних шарів. Для здійс-

нення механічної деформації до відповідного шаруватого елемента (спінового клапану) додається п'єзоелектричний шар, що може деформуватись під дією прикладеної електричної напруги. Така структура має деякі відмінності від дослідженої раніше структури непровідної ЗІГ-PZT і через практично непрозорість металевих плівок вимірювання їх намагніченості здійснюється за допомогою магнітооптичного ефекта Керра по традиційній схемі з проходженням відбитого від поверхні плівки поляризованого променя крізь поляризатор-аналізатор і реєстрацією його інтенсивності фотоприймачем.

Отримана форма петель гістерезисну характерна для структур із шарами, які взаємодіють між собою обмінно або магнітостатично. В даному випадку на цю взаємодію додатково впливає одноосна анізотропія, наведена в результаті деформації феромагнітних шарів. З рис.6 видно, що цей вплив суттєво залежить від напрямку дії сил, що деформують феромагнітний шар, відносно як осей ростової анізотропії шарів, так і напрямку прикладеного зовнішнього магнітного поля.

Енергія механічних напружень вибиралась таким чином, щоб вона була співрозмірна як із ростовою анізотропією, так і з наведеною зовнішнім магнітним полем. Такий випадок не тільки відповідає найбільш ефективному прояву анізотропії, наведеної деформацією, а і моделює реальні шаруваті структури спінових клапанів, в яких індукована механічним напруженням анізотропія хоча, звичайно, і перевищує ростову, але по порядку величини співрозмірна із анізотропією, індукованою зовнішнім магнітним полем.

Таким чином, прикладанням механічного напруження до шаруватої наноструктури можна змінювати величину наведеної одноосної анізотропії, і відповідно, змінювати магнітне поле, необхідне для переорієнтації вектора намагніченості. Зменшення витрат енергії на перемагнічування в цьому випадку досягається за рахунок кращої локалізації механічного напруження в нанорозмірній локальній області. Залишкове механічне напруження може підтримувати встановлений розподіл намагніченості.

Форму ж петлі магнітного гістерезису (яка визначає, наприклад, характеристику датчика магнітного поля) шаруватої структури можна змінювати шляхом зміни величини деформації чутливого магнітострикційного шару.

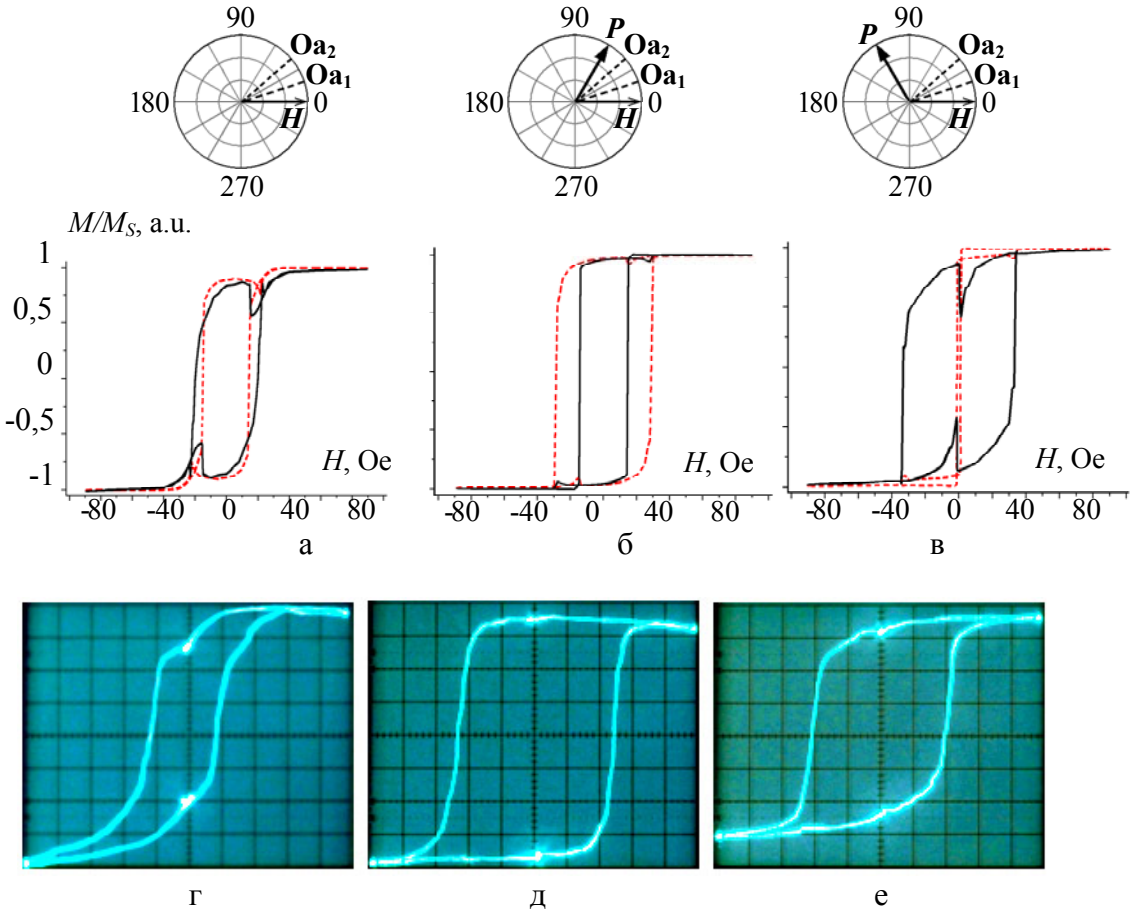


Рис.19. Розрахункові петлі гістерезису першого (пунктирна крива) та другого (суцільна крива) шарів Fe тришарової структури Fe/Cu/Fe при різних величинах прикладеного механічного напруження, яке характеризується коефіцієнтом K_P (енергією наведеної п'єзонапруженням анізотропії) і напрямках кута φ_{PH} між віссю 1-осної анізотропії P, наведеної механічним напруженням та прикладеним полем H: а) $K_P=0$; б) $K_P=10^4\ \frac{\text{ерг}}{\text{см}^3}$, $\varphi_{PH}=60°$; в) $K_P=10^4$ ерг/см^3, $\varphi_{PH}=120°$, та для порівняння петлі гістерезису, отримані експериментально (г), форма яких приблизно подібна до відповідних розрахункових (для одного з шірів). Верхні діаграми на вставках показують відносне розташування осей 1-осної анізотропії та прикладеного магнітного поля.

4.4. Завдання для моделювання перемагнічування під дією струму поляризованих електронів.

Перша частина завдання складаэться з оцінки теплової дії спінового струму при протіканні крізь шарувату плівкову сендвіч-структуру (спіновий клапан).

Дана задача є задачею із неповними умовами (тобто подібно до багатьох наукових проблем), для розв'язку якої необхідно ввести частину даних і відповідно визначити, як залежатиме кінцевий результат від введених переметрів. Основний підхід до вирішення нижчеприведеної проблеми визначається достатньо простими методами з використанням джоулева тепла і елементарних термодинамічних співвідношень.

Є тонкоплівкова шарувата структура типу «спінового клапана», що складається з двох основних феромагнітних (ФМ) наношарів заліза (Fe), розділених немагнітним прошарком, у якості яких може бути як металева провідна мідь (Cu), так і діелектричні прошарки з оксиду алюмінію Al_2O_3 або магнію MgO. В останньому випадку клапан (який має назву MTJ - magnetic tunnel junction) має дуже високий електричний опір, тому працює в режимі тунельних струмів (величиною порядку одиниць мкА). Тому поки орієнтуємося на повністю металевий тип Fe-Cu-Fe. У ньому електричний струм, протікаючи поперек шарів (а через дрейф носіїв електрони при будь-якому розташуванні електродів перетинають всі тонкі наношари завтовшки від декількох одиниць до декількох десятків нанометрів), поляризується в одному з шарів Fe (умовно в першому по ходу), намагнічених у заданому напрямку в площині плівки. Далі, частково поляризовані електрони, привносячи отриману переважну орієнтацію спінів до іншого ФМ шару, можуть перемагнічувати його в тому випадку, якщо їх сумарний магнітний момент достатній для цього. У грубому наближенні можна вважати, що кількість електронів, що становить ~ 1% від кількості магнітних іонів металу може його перемагнітити, втім точніше значення енергії перемагнічування можна визначити спеціальними методами, яких ми поки що не торкатимемося.

***Отже, потрібно визначити, якої величини струм (найімовірніше, короткі імпульси, а тоді - і якої тривалості) необхідно пропустити через тонкоплівкову структуру, щоб він міг перемагнітити другий шар**, з урахуванням того, що розігрів шару імпульсом струму (або тривалим середнім струмом) не повинен перевищувати декількох десятків градусів - тобто десь загалом до ~90° Цельсія максимум (у випадку коротких імпульсів можна вважати розсіяння тепла із зони нагріву струмом нехтовно малим). Причому структура, досить протяжна в площині (розмірами в мм-ри або*

навіть в см-ри, взагалі кажучи, представляє тільки теоретичний інтерес; на практиці перемагнітити в результаті необхідно стовпчик розмірами порядка 10 нм у діаметрі в площині і приблизно такою ж, або у кілька разів більшою висотою (але всі геометричні розміри можна варіювати, принаймі у кілька разів).

Як відповідь можна будувати залежності, наприклад, сили струму, необхідного для перемагнічування, від тривалості імпульсу, або об'єму (діаметру та/або висоти) елемента, що перемагнічується. В будь-якому випадку необхідно запропонувати принаймі нульовий варіант власного підходу до вирішення цієї проблеми, вибравши власні параметри середовища і умов експерименту.

Примітки.

1. Зазвичай струми в пару десятків міліампер начисто випалюють плівкові провідні шари товщинами у десятки нанометрів. Реальні експериментальні значення напруги не перевищують кількох десятих вольта, а струмів – кількох десятків мікроампер (але це для постійних і тривалих послідовностей імпульсів; разові пікові значення можуть бути дещо вищими).

2. Всі необхідні параметри заліза - щільність, пит. опір, намагніченість, концентрація іонів, магнітний момент на один іон, теплоємність і т.д. і т.п. можна знайти у довідниках або розрахувати. Експериментально визначене значення намагніченості на один атом заліза $M_{Fe}=2{,}2\,\mu_Б$*, для іона* Fe^{2+}*:* $M_{Fe^{2+}}=5{,}4\,\mu_Б$*; для* Fe^{3+}*:* $M_{Fe^{3+}}=5{,}9\,\mu_Б$*; озрахункові ж значення для іонів Fe лежать в діапазоні* $(4\div6{,}7)\cdot\mu_Б$*.*

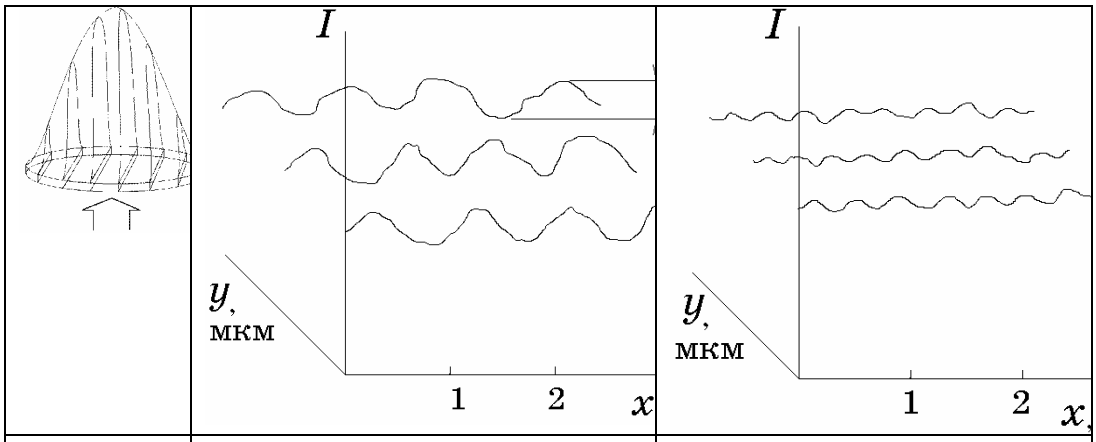
3. Ступінь поляризації визначається як відношення різниці спінів, орієнтованих у різних напрямках до їх суми (тобто до загального числа всіх спінів). Для ФМ металів характерні величини поляризації струму електронів складають приблизно 5÷10%, може бути і до 30%, але це вже на практиці при некріогенних температурах малоймовірно.

Додатково ще можна врахувати, наприклад, контакт одного із шарів зі скляною підкладинкою, що відводить частину тепла навіть при короткочасному імпульсному впливі, а при тривалому можна враховувати і теплові втрати у повітрі.

5. Методика оптичної реєстрації доменних структур.

Проблема, що пропонується для розгляду, витікає із загальної проблеми обмеженості оптичної роздільної здатності. Як відомо, критерій Релєя є констатацією того факту, що через хвильову природу світла неможливо розрізнити оптично два об'єкти, які знаходяться на відстані один від одного приблизно меншій за половину довжини хвилі опромінюючого світла. В той же час, існує ряд методів, як наприклад, реєстрація фази оптичної хвилі, чутливість яких дозволяє проводити оптичні вимірювання із просторовою роздільною здатністю в нанометровому діапазоні і часом навіть вимірювати долі нанометрів, тобто доходити майже до атомарного рівня. Ближньопольові методи також дозволяють досліджувати об'єкти з роздільною здатністю до 10 нм (хоч більш реально до 30 нм), а при використанні флуоресцентної технології – навіть до 5 нм.

Таким чином, в деяких випадках критерій Релєя можна перевищити. Одним із таких випадків є дифракційна гратка або подібна їй за структурою система смугастих доменів прозорого феромагнетика. Коли крізь таку структуру смужок проходить лазерний промінь, то пропускання в різних частинах променя різне: через «темні» смуги промінь не проходить, або проходить послаблений, а крізь світлі (прозорі) проходить майже без втрат або з невеликим послабленням. Оскільки розподіл інтенсивності світла в поперечнику променя може бути описаний гаусовою функцією $z(x,y) = e^{-(x2+y2)}$, то кількість (інтенсивність) світла, що проходить або затримується відповідними смугами має бути визначено як об'єм відповідної частини тіла обертання, відділеної площинами перерізу (рис.1). З рис. видно, що інтенсивність пропущеного смугами світла буде різною, в залежності від того, чи рівні об'єми «світлих» та «темних» фігур, чи вони різні. В останньому випадку можна співвіднести ці об'єми, визначивши т.ч. співвідношення мінімальної та максимальної інтенсивностей світла при його скануванні смугастої структури в поперечному напрямку.



а	*б*	*в*

Рис.20. Переріз лазерного променя (*а*) із «темними» та «світлими» «об'ємами випромінювання» та зміна інтенсивності при скануванні лазером смугастої решітки в поперечному напрмку (*б*), (*в*).

При збільшенні кількості смуг, що поміщаються в одному промені (в межах сфокусованої до розмірів півтори-дві довжини хвилі плями лазерного променя) величина зміни інтенсивності світла, що проходить при скануванні, швидко зменшується. Тим не менше, просторові періодичності зміни інтенсивності сигнала сканування, розміри якого менші за довжину хвилі світла, дозволяє визначати т.ч. період субмікронних доменів.

5.1. Завдання по визначенню максимальної роздільної здатності*. Визначити, яку максимальну кількість смуг можна помістити в плямі, щоб зміна інтенсивності ще реєструвалась (а впевнено реєструються зміни не гірші за ~0,1% від максимуму інтенсивності).*

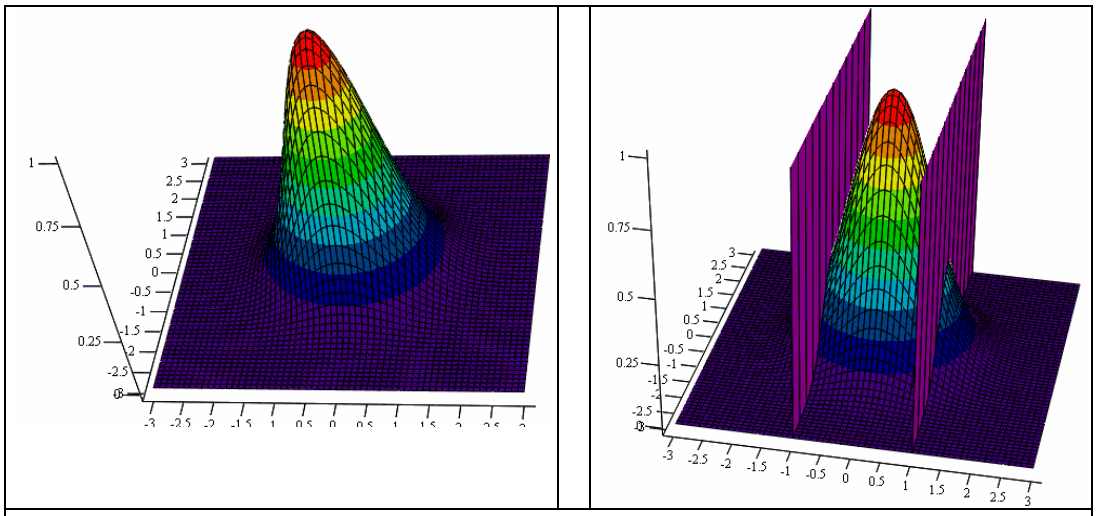


Рис.21. Тіло обертання, утворене обертанням гаусової кривої навколо вертикальної осі симетрії (*а*); тіло обертання з площинами перерізу (*б*).

Прим. Фактично дана задача зводиться до визначення співвідношення об’ємів, на які ділять гаусів «колокол» вертикальні площини перерізу. Таким чином, в подвійному інтегралі об’єму, по одній координаті межі інтегрування будуть від початку до кінця, а по іншій – в межах, що визначаються сусідніми площинами перерізу.

Кількість смуг простіше брати 2, 3, 4, 6, 12, якщо межі зміни x та y встановити від -3 до +3; за межами цього діапазону гаусова функція має нехтовно малі значення.

На рис.21*б* видно, що центральна частина фігури (від -1 до +1) сильно перевищує за об’ємом суму двох інших (від -3 до 1 та від +1 до +3). В той же час, при зміщенні однієї з площин перерізу на центр фігури (тобто щоб площина перетинала точку x=0), об’єми (інтенсивності) частин променів, що пройшли і затримались будуть рівними.

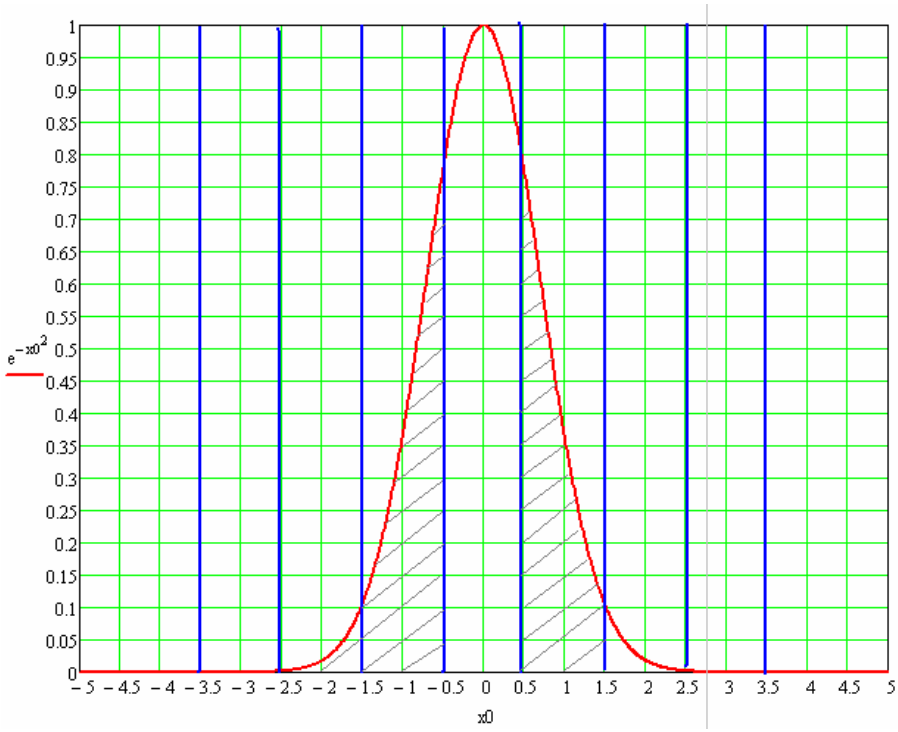


Рис.22. Двовимірна гаусова крива. Сканування доменних структур з періодом, меншим за діаметр світлового променя.

Отже, для збільшення можливостей методики по виявленню субмікронних доменів, гранул, магнітних мікронеоднорідностей по ефектах Фарадея або Керра можна застосовувати сканування сфокусованим променем періодичної структури доменів по двох координатах x та y (в напрямках поперек та вздовж доменних стінок) і вимірювати інтенсивність світла $I=f(x, y)$ (рис.22).

Особливістю даної методики є можливість відтворення доменних структур з періодом $d < D \sim \lambda$. Це досягається завдяки зміні інтенсивності сигналу, що реєструється, з періодичністю, яка відповідає періоду доменної структури, що сканується. Величина інтенсивності світла, що проходить крізь смуговий домен на відстані x від осі променя $\Delta I(x) \sim e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot \sqrt{\frac{R^2 - x^2}{2\pi}}$, де R – радіус світлової плями, розраховувалась з гаусового розподілу інтенсивності

$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ в промені. Вважаючи, що інтенсивність світла пропорційна об'єму V тіла обертання, утвореного гаусовою кривою: $V = 2\int_{x_1}^{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}} \ln(\sqrt{2\pi} \cdot x)^{-1} dx$, можна розрахувати співвідношення інтенсивностей світла, що проходить через світлі та темні смуги.

5.2. Завдання для моделювання перемагнічування під дією поляризованого світла.

Кристалічна феримагнітна структура (на прикладі залізо-ітрієвого (ЗІГ) ферит-гранату - $Y_3Fe_5O_{12}$) опромінюється поляризованим світлом заданої інтенсивності. Як джерела випромінювання можуть бути: лазери червоного (λ=0,628 мкм) та інфрачервоного (λ=1,15 мкм) діапазонів малої потужності, порядка ~1÷2 мВт; лазер більшої потужності - ~10÷15 мВт, або середньої потужності – до 50 мВт, які утворюють світлову пляму на зразку розмірами (діаметром) від 1÷2 мм до 10÷20 мкм.

При опромінюванні світло частково поглинається (коефіцієнт поглинання чистого ЗІГ - α=800 см$^{-1}$ на довжині хвилі λ=0,628 мкм), а частково проходить крізь зразок. Поглинуте світло спричиняє електронні переходи $Fe^{2+} \leftrightarrow Fe^{3+}$ між дво- та тривалентними іонами Fe, в результаті чого змінюється розподіл іонів різної валентності у вузлах кристалічної гратки різного типу (октаедричних та тетраедричних) із різною локальною анізотропією. Це призводить до зміни результуючої анізотропії кристалу, як кубічної, так і, можливо, наведеної одноосної, в результаті чого може змінюватись напрямок намагніченості (доменна структура) в опроміненій області.

Для вирішення задачі **необхідно оцінити інтенсивність світла**, яка може викликати зміну орієнтації вектора намагніченості при заданих параметрах матеріалу (ЗІГ), тобто відомій кількості анізотропних центрів із врахуванням термічної релаксації (остання визначається, головним чином, температурою зразка і є малою при температурах рідкого азоту - T=78 К, суттєво збільшуючись при кімнатних температурах. **Коерцитивність**, яку при цьому повинен мати зразок для стабільного утримання вектора намагніченості в новому напрямку, також **може бути визначена**.

Нотатки. Кристалічна структура ЗІГ ($Y_3Fe_5O_{12}$) – кубічна, стала гратки a=1,2 нм. Кубічну гратку складають 8 формульних одиниць.

Елементарний об'єм гратки (з 8-ми ф-них од.) $a^3=(1{,}2\cdot10^{-9})^3=1{,}728\cdot10^{-27}$ м^3
Електронна конфігурація: $^{39}Y_{89}$ 2-8-18-9-2; $^{26}Fe_{56}$ 2-8-14-2 ; $^{8}O_{16}$ 2-6.
Маса 8-ми формульних одиниць ЗІГ складає:
$M_8=(88{,}9\times24+55{,}847\times40+16\times96)\times1{,}667\times10^{-27}=5903{,}48\times(1{,}67\times10^{-27})=9{,}8\times10^{-24}$ кг.
Густина (маса одиниці об'єму) $\rho=(3{,}47\div3{,}83)\cdot10^3$ кг/м^3 ; $\rho_{серед}=3{,}6\cdot10^3$ кг/м^3.
Кількість формульних одиниць в 1 м^3 : $N_8=1$ м$^3/1{,}728\cdot10^{-27}$ м$^3=5{,}787\cdot10^{26}$ шт.
Перевірка густини: $N_8\times M_8=5{,}6\times10^3$ кг/м$^3\neq3{,}6\times10^3$ кг/м^3 - тобто у 1,5 рази не співпадає. Втім, якщо враховувати спільність формульних атомів (іонів) у сусідніх комірках, то на один припадатиме 5 формульних одиниць і в такому випадку $\rho=5{,}67\times(5/8)=3{,}6$ (!)
Інтенсивність світла, що падає, - максимальна площа: а) 1 мВт на **1 мм^2** $=10^{-3}\times10^{-6}=10^{-9}$ Вт/мм^2;
- мінімальна: б) 1 мВт на (**10×10**) **мкм^2** $=10^{-3}\times10^{-10}=10^{-13}$ Вт/мм^2.
Енергія квантів світла з $\lambda=628$ нм : $h\nu=hc/\lambda=6{,}62\cdot10^{-34}\times3\cdot10^8/0{,}628\cdot10^{-6}=3{,}16\cdot10^{-19}$ Дж.
Прим. Енергію квантів світла з $\lambda=1{,}15$ нм можна оцінити самостійно (саме ближнє інфрачервоне випроомінювання просвічує товсті кристали ЗІГ і викликає в них фотомагнітні ефекти перемагнічування).
Кількість квантів за 1 секунду в промені потужністю 1 мВт: $N_\nu=10^{-3}/3{,}16\cdot10^{-19}=3{,}16\cdot10^{15}$ с$^{-1}$.
Коефіцієнт поглинання ЗІГ для $\lambda=628$ нм: $\alpha=800$ см$^{-1}$; для $\lambda=1{,}15$ нм $\alpha=7$ см$^{-1}$.
$I_{пр}/I_{пад}=e^{-\alpha x}$ – закон поглинання світла (закон Бугера-Ламберта-Бера).
Вважаючи, що всі* поглинуті кванти (фотони) призводять до локальної переорієнтації магнітних моментів, треба визначити інтенсивність світла с довжиною хвилі $\lambda=1{,}15$ мкм, при якій така переорієнтація буде мати місце в опромінюваній області кристала товщиною 0,4 мм (нехтуючи релаксацію, але враховуючи відбиття світла на передній полірованій грані кристала відповідно до формули Релєя для коефіцієнта відбиття від передньої грані: $R=(n-1)^2/(n+1)^2$ (коефіцієнт заломлення ЗІГ $n=2{,}2$).
Отже, необхідно визначити:
1) інтенсивність відбитого кристалом світла;
2) інтенсивність світла, що пройшло крізь кристал;
3) інтенсивність світла, що відбилась від задньої грані і повернулась в кристал (і додати її до поглинутої частини чи знехтувати через малість);

4) кількість квантів (фотонів) світла довжиною хвилі $\lambda = 1,15$ мкм (потужність 10 мВт), які поглинулись кристалом заданої товщини 0,4 мм;
5) задавши площу опромінення (від 10×10 мкм^2 до 1×1 мм^2), визначити кількість іонів Fe в об'ємі з цією площею і товщиною кристала 0,4 мм;
6) співставивши кількість поглинутих фотонів за деякий час (наприклад, за 1 секунду або за 10 с) і кількість іонів (або в заданому об'ємі, або на одиницю об'єму), можна зробити висновок про можливість чи неможливість переорієнтації магнітних моментів необхідної кількості іонів (принаймі, більше половини), і відповідно, про можливість оптичного (т. зв. фотомагнітного) перемагнічування зразка за цей час, тобто фактично, треба визначити час опромінювання заданої площі, за який кристал отримає необхідну кількість квантів світла, співрозмірну з числом іонів Fe^{2+} (а їх на формульну одиницю з 40 штук – 16, інші 24 – Fe^{3+}).*

* ***Прим***. При оцінці кількості фотонів світла, необхідно ще прийняти до уваги «коефіцієнт поляризації», який враховував би той факт, що в лінійно поляризованому світлі на перемагнічування іонів Fe впливає тільки та частина фотонів, поляризація яких наближена до поляризації іонів (це число порядка $k \sim ½$, тобто приблизно половина від усіх поглинутих фотонів).

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. – М., 1983. – Т.3. – 688 с.
2. *Матвеев А.Н.* Электричество и магнетизм. – М., 1985. – 463 с.
3. *Иродов И.Е.* Электромагнетизм. Основные законы. – М., 2001. – 352 с.
4. *Л.Д.Дідух.* Електрика та магнетизм: підручник. Тернопіль. Вид. «Підручники і посібники». - 2020. - 464 с.
5. І.М.Кучерук. Загальна фізика. Електрика і магнетизм. - К.: Вища школа, 1995.- 392 с.
6. *Кринчик Г.С.*. Физика магнитных явлений. М.: МГУ.-1985.-336 с.
7. *Товстолиткін О.В., Боровий М.О., Курилюк В.В., Куницький Ю.А* Фізичні основи спінтроніки. - «Нілан-ЛТД», Вінниця. - 2014. - 500 с.
8. *Третяк О.В., Львов В.А., Барабанов О.В.*. Фізичні основи спінової електроніки. - Київський унів-т, Київ. - 2002.-314 с.
9. *Погорілий А.М., Рябченко С.М., Товстолиткін О.І.* Спінтроніка. Основні явища. Тенденції розвитку. Укр.фіз.журн. Огляди 2010. - Т.6, №1. - С.37-95.
10. *Кругляк Ю. А.*. Наноэлектроника «снизу – вверх»: начала спинтроники и магнетроники. Scient. Journal "ScienceRise" №8/2(13) 2015.
11. *Балбашов А.М., Червоненкис А.Я.* Магнитные материалы для микроэлектроники. - М.: Энергия. 1979. - 216 с.

ЗМІСТ

Назва пункту	Стор.
Вступ до спінтроніки.	3
1. Основні теоретичні відомості з курсу “Електрика і магнетизм”	4
2. Модель перемагнічування Стонера-Вольфарта	8
3. Моделювання перемагнічування шаруватих структур за допомогою енергетичних діаграм	12
3.1. Завдання для побудови петель магнітного гістерезису зв’язаних наношарів.	17
4. Моделювання перемагнічування об’ємного кристалу.	19
4.1. Особливості перемагнічування анізотропного об’ємного кристалу.	23
4.2. Завдання для моделювання п’єзоперемагнічування об’ємного кристалу.	25
4.3. Моделювання на основі принципів стрейнтроніки: п’єзоперемагнічування шаруватих сендвіч структур із наношарів і об’ємної кристалічної плівки.	27
4.4. Завдання для моделювання перемагнічування під дією струму поляризованих електронів.	35
5. Методика оптичної реєстрації доменних структур.	19
5.1. Завдання по визначенню максимальної роздільної здатності.	38
5.2. Завдання для моделювання перемагнічування під дією поляризованого світла.	41
Список рекомендованої літератури	43