

05,06

Обменная связь слоя $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ со слоем феррита висмута: срез (110)

© А.А. Берзин¹, А.И. Морозов^{2,¶}

¹ Московский технологический университет (МИРЭА),
Москва, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия

¶ E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 13 декабря 2016 г.)

Рассчитана величина обменной связи ферромагнитного нанослоя $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ с нанослоем мультиферроика феррита висмута (BiFeO_3). Предложены два возможных варианта согласования кристаллической структуры слоев. Показано, что энергия взаимодействия слоев достаточна для записи информации в слое $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$, входящем в состав магнитного туннельного соединения, путем приложения электрического поля к слою феррита висмута.

Работа поддержана РФФИ (грант 17-12-01435).

DOI: 10.21883/FTT.2017.07.44592.444

1. Введение

В предшествующих работах [1–3] было показано, что мультиферроик феррит висмута является перспективным материалом для создания магнитоэлектрической памяти с записью электрическим полем (MERAM). Приложение электрического поля к электрочувствительному слою феррита висмута приводит к развороту вектора спонтанной поляризации и связанного с ним вследствие спин-орбитального взаимодействия вектора антиферромагнетизма. Это в свою очередь вызывает поворот вектора намагниченности обменно-связанного со слоем BiFeO_3 (далее ВFO) ферромагнитного слоя, входящего в состав магнитного туннельного соединения, которое состоит из двух проводящих ферромагнитных слоев, разделенных немагнитной диэлектрической прослойкой. В тонких слоях ВFO на сжимающей и растягивающей подложках, в отличие от объемных образцов, реализуется антиферромагнитное упорядочение *G*-типа [4]. Сжимающими являются подложки $(\text{LaAlO}_3)_{0.3}(\text{Sr}_2\text{AlTaO}_6)_{0.7}$ и SrTiO_3 , а растягивающими — подложки NdScO_3 и PrScO_3 .

Как показано в работах [3,5], для разворота намагниченности ферромагнитного слоя на угол порядка π срез соседствующего с ним феррита висмута должен быть компенсированным, т.е. атомные плоскости ВFO, параллельные срезу, должны содержать равное число атомов железа, принадлежащих к двум разным магнитным подрешеткам.

В недавней работе [6] была исследована эволюция векторов антиферромагнетизма и слабого ферромагнитного момента в процессе переполяризации ВFO электрическим полем и найдены комбинации „срез — деформация, созданная подложкой, — направление приложения электрического поля“, оптимальные для создания прототипа MERAM.

Оказалось, что наряду со срезом (100) компенсированный срез (110) на растягивающей подложке перспективен для MERAM с продольной записью и приложением электрического поля перпендикулярно слоям [7], а также для перпендикулярной записи и приложением электрического поля в плоскости слоя.

Обменная связь ферромагнитного слоя $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ (далее CoFe) со слоем ВFO для компенсированного среза (100) была рассмотрена в работе [2]. Были найдены искажения магнитных параметров порядка вблизи границы раздела слоев и показано, что величина обменной энергии связи достаточна для управления намагниченностью ферромагнитного слоя.

Аналогичное рассмотрение для среза (110) не проводилось, этому вопросу посвящена данная работа.

2. Атомная структура границы раздела

Магнитные атомы железа в ВFO образуют простую кубическую решетку со стороной 3.965 \AA и слабым ромбоэдрическим искажением ($\alpha = 89.4^\circ$) [8], которым мы будем пренебрегать. Их расположение в нечетных и четных атомных плоскостях (110) (нумерация плоскостей в обоих слоях начинается от границы раздела) изображено на рис. 1. Атомы, принадлежащие к первой и второй антиферромагнитным подрешеткам, изображены черными и белыми кружками соответственно. Слой CoFe является аморфно-нанокристаллическим [9]. Кристаллическое соединение $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ имеет ОЦК решетку с ребром 2.81 \AA [10].

При квазиэпитаксиальном росте CoFe на срезе (110) феррита висмута направление $[1\bar{1}0]$ решетки CoFe должно совпадать с направлением $[001]$ решетки ВFO, а направление $[001]$ решетки CoFe — с направлением $[110]$

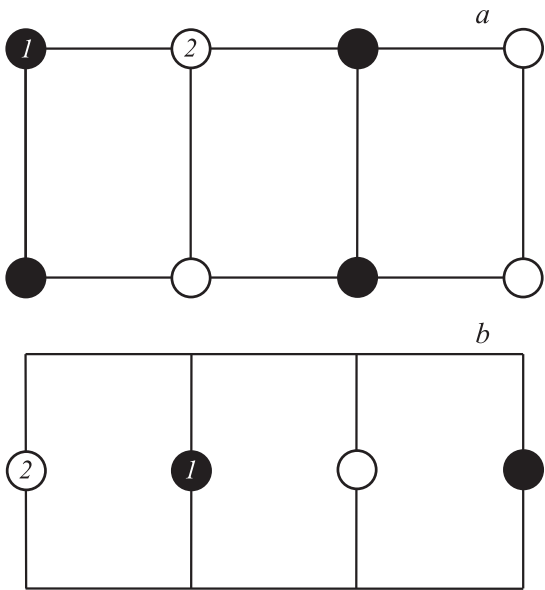


Рис. 1. Расположение атомов железа в нечетных и четных атомных плоскостях (110) ВFO. Цифры обозначают номер подрешетки.

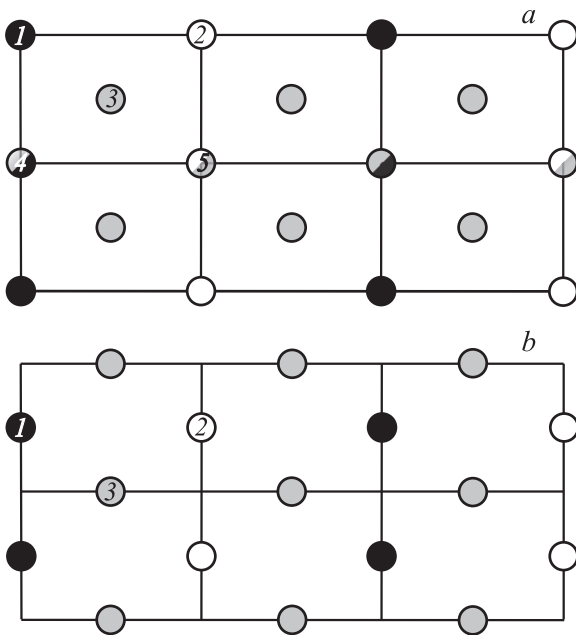


Рис. 2. Расположение атомов в соседних атомных плоскостях (110) СоFe. Цифры обозначают номер подрешетки.

решетки ВFO. Такая ориентация ведет к минимальному несовпадению решеток порядка 0.2%.

Расположение атомов ферромагнетика в соседних атомных плоскостях (110) изображено на рис. 2. Далее оно повторяется с периодом в две атомные плоскости.

Возможны два варианта согласования кристаллических структур слоев. В первом из них над атомной плоскостью (110) ВFO (рис. 1, *a*) расположена атомная плоскость СоFe, изображенная на рис. 2, *a*, а во втором

варианте — атомная плоскость СоFe, изображенная на рис. 2, *b*. Рассмотрим их последовательно.

Вариант 1. В этом случае часть атомов граничной атомной плоскости СоFe располагается над атомами железа, находящимися в граничной атомной плоскости ВFO.

На границе раздела слоев имеет место спин-флоп ориентация: вектор намагниченности граничной плоскости ферромагнетика ортогонален вектору антиферромагнетизма граничной плоскости антиферромагнетика [11] (рис. 3). Величина θ_1 угла скоса намагниченностей подрешеток антиферромагнетика в граничной плоскости не мала и намного превосходит значение θ_0 угла скоса в объеме ВFO, составляющее величину порядка 1° [12]. Это закономерно, так как его величина обусловлена конкуренцией межслойного и внутрислойного гейзенберговского обмена, а не слабым взаимодействием Дзялошинского–Мории [13,14].

В слое СоFe в данном случае можно выделить пять магнитных подрешеток. Атомы первой (второй) подрешетки принадлежат плоскостям (110) ферромагнетика, проходящим перпендикулярно срезу через атомы соответствующей подрешетки феррита висмута, принадлежащие его граничной атомной плоскости. Исключение составляет ближайшая к границе раздела плоскость (110) СоFe. В ней существуют атомы первой (второй) подрешетки, находящиеся строго над атомами соответствующей подрешетки ВFO, и атомы, под которыми нет атомов граничной плоскости ВFO. Такие атомы мы выделим в четвертую (пятую) подрешетку граничной плоскости СоFe. Оставшиеся атомы СоFe относятся к третьей подрешетке (рис. 2).

Смысл выделения подрешеток СоFe заключается в том, что вследствие межслойного обменного взаимодействия спины ферромагнетика отклоняются от направления средней намагниченности на углы $\varphi_{\alpha i}$ (α — номер подрешетки, i — номер атомной плоскости (110)), вследствие чего в ферромагнетике возникает наведенный антиферромагнитный параметр порядка. Разворот происходит в плоскостях параллельных плоскости, об-

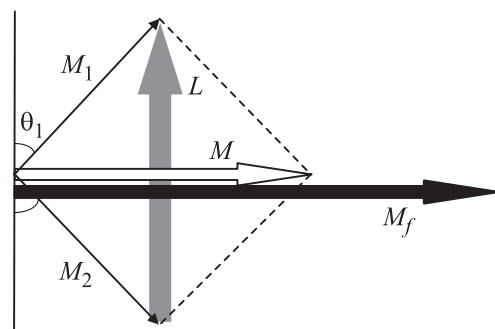


Рис. 3. Спин-флоп ориентация на границе раздела слоев СоFe и ВFO. L , M , M_1 , M_2 и θ_1 — векторы антиферромагнетизма, намагниченности, намагниченностей подрешеток и угол скоса подрешеток граничной плоскости ВFO, M_f — вектор намагниченности СоFe.

разованной вектором антиферромагнетизма ВFO и вектором намагниченности CoFe. При положительном знаке межслойного обменного интеграла спины подрешеток 1 и 2 граничной атомной плоскости ферромагнетика отклоняются так, чтобы уменьшить угол между направлением данного спина и направлением спина ближайшего к нему атома железа в граничной атомной плоскости ВFO. Значения углов θ_j и φ_{ai} находятся путем минимизации суммарной энергии системы.

Вариант 2. В случае, когда атомная плоскость ВFO (рис. 1, *a*) граничит с плоскостью CoFe, изображенной на рис. 2, *b*, спины всех атомов первой (второй) подрешеток последней отклоняются на одинаковый угол, и нет необходимости вводить четвертую (пятую) подрешетку. Кроме того, каждый из атомов железа граничной плоскости ВFO взаимодействует не с одним, а с двумя атомами граничной плоскости CoFe.

3. Энергия системы классических спинов

Для расчета энергии данной двухслойной системы рассмотрим локализованные классические спины при температурах $T \ll T_N$ (T_N — температура Нееля ВFO) и $T \ll T_C$ (T_C — температура Кюри CoFe), когда модули локализованных спинов можно считать неизменными. Рассмотрение будет вестись в обменном приближении, поскольку оценка вклада одноионной анизотропии показала, что он пренебрежимо мал [15]. При этом мы ограничимся взаимодействием ближайших соседей.

В силу того, атомы третьей подрешетки CoFe имеют в своем ближайшем окружении одинаковое число соседей, принадлежащих к первой (четвертой) и второй (пятой) подрешеткам, углы $\varphi_{3i} \equiv 0$. В силу симметрии $\varphi_{1i} = -\varphi_{2i} \equiv \varphi_i$, а $\varphi_{4,1} = -\varphi_{5,1} \equiv \chi$.

С учетом изложенного энергии гейзенберговского обменного взаимодействия и антисимметричного обмена Дзялошинского–Мории в ВFO имеют вид

$$W_{af}^{ex} = -N|J_{af}|\{\cos(\theta_1 + \theta_2) + \cos 2\theta_1 + \sum_{j \geq 2}^{\infty} [\cos(\theta_j + \theta_{j-1}) + \cos(\theta_j + \theta_{j+1}) + \cos 2\theta_j]\},$$

$$W_{af}^{DM} = -ND\{\sin(\theta_1 + \theta_2) + \sin 2\theta_1 + \sum_{j \geq 2}^{\infty} [\sin(\theta_j + \theta_{j-1}) + \sin(\theta_j + \theta_{j+1}) + \sin 2\theta_j]\},$$

где N — число элементарных ячеек в атомной плоскости (110) ВFO. Обменные интегралы J_f , J_{af} и $J_{f,af}$ описывают гейзенберговское обменное взаимодействие соседних спинов CoFe, ВFO и спинов разных слоев на границе раздела соответственно, D — константа, описывающая антисимметричный обмен соседних спинов ВFO. Величины спинов включены в соответствующие обменные интегралы.

Энергию гейзенберговского обменного взаимодействия ферромагнетика для первого варианта согласования кристаллических решеток слоев можно представить в виде

$$W_f^{ex} = -2NJ_f\{2 \cos \chi + \cos(\varphi_2 - \chi) + 2 \cos \varphi_1 + \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + \sum_{i \geq 2}^{\infty} [4 \cos \varphi_i + 2 \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i)] + \text{const}\}.$$

Для второго варианта согласования величину χ следует заменить на φ_1 .

Энергия межслойного гейзенберговского обменного взаимодействия кристаллических решеток слоев равна:

вариант 1

$$W_{f,af}^{ex} = -NJ_{f,af} \sin(\theta_1 + \varphi_1) \equiv -NC \sin(\theta_1 + \varphi_1);$$

вариант 2

$$W_{f,af}^{ex} = -2NJ_{f,af} \sin(\theta_1 + \varphi_1) \equiv -NC \sin(\theta_1 + \varphi_1).$$

4. Численное моделирование

Для нахождения величин θ_0 , θ_j , χ и φ_i использовалась система уравнений, полученная из условия минимальности суммарной энергии $W = W_{af}^{ex} + W_{af}^{DM} + W_f^{ex} + W_{f,af}^{ex}$ как функции указанных параметров. Решение системы находилось численными методами с использованием пакета Wolfram Mathematica для значений параметров J_f , J_{af} , $J_{f,af}$ и D , полученных в работах [16–18] и приведенных в табл. 1.

Величины $\theta_j - \theta_0$ и φ_i убывают экспоненциально с ростом номера атомной плоскости на межатомных расстояниях [19,1,2]. Поэтому для замыкания системы уравнений использовались соотношения $\varphi_{10} = 0$ и $\theta_{10} = \theta_0$.

Энергия взаимодействия слоев определялась как разность энергии W и суммы энергий невзаимодействующих слоев.

Результаты расчетов для обоих вариантов согласования кристаллических решеток приведены в табл. 2.

Значения энергий взаимодействия слоев в расчете на одну ячейку ВFO в плоскости слоя для первого и второго вариантов согласования равны соответственно $1.95 \cdot 10^{-21}$ Дж и $1.65 \cdot 10^{-21}$ Дж. Их следует сравнить с барьером U между двумя „легкими“ направлениями

Таблица 1. Экспериментальные значения констант

Константа	Значение	Лит. ссылка
C	$8 \cdot 10^{-21}$ Дж	[16]
J_f	$7 \cdot 10^{-21}$ Дж	[17]
J_{af}	$-4.4 \cdot 10^{-21}$ Дж	[18]
D	$1.1 \cdot 10^{-22}$ Дж	[18]
A	$3.6 \cdot 10^4$ Дж/м ³	[20]

Таблица 2. Значения углов разворота магнитных моментов

Угол разворота	Значение в градусах	
	Вариант 1	Вариант 2
θ_1	18.137	18.802
θ_2	-3.971	-4.148
θ_3	1.936	1.983
θ_4	0.353	0.340
θ_5	0.777	0.780
θ_6	0.663	0.663
θ_7	0.694	0.694
θ_8	0.686	0.686
θ_9	0.688	0.688
θ_{10}	0.687	0.687
φ_1	9.984	5.387
φ_2	1.396	1.443
φ_3	0.374	0.387
φ_4	0.100	0.104
φ_5	0.027	0.028
φ_6	0.007	0.007
φ_7	0.002	0.002
φ_8	0.001	0.001
φ_9	0.000	0.000
φ_{10}	0.	0.
χ	0.465	—

намагниченности в слое CoFe толщиной d , также рассчитанным на площадь одной ячейки BFO в плоскости слоя. Условие переключения магнитного момента ферромагнитного слоя электрическим полем, приложенным к слою мультиферроика, имеет вид $|W_{int}| > \Delta W_f^{an}$ [15]. Используя экспериментальное значение константы анизотропии A в слое CoFe из табл. 1, получаем ограничение сверху на толщину данного слоя $d < 240$ nm или $d < 220$ nm для первого и второго вариантов соответственно.

5. Заключение

Таким образом, предложено два варианта согласования кристаллических слоев $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ и BiFeO_3 .

Для обоих вариантов рассчитаны величины граничных искажений магнитных параметров порядка и энергия взаимодействия слоев, а также получено ограничение сверху на толщину ферромагнитного слоя, для которой возможен индуцированный взаимодействием слоев разворот намагниченности ферромагнетика.

Поскольку это ограничение намного превосходит требуемую толщину нанослоя CoFe в единицы — десятки нанометров, создание MERAM на основе среза (110) феррита висмута представляется вполне возможным.

Список литературы

- [1] Д.Л. Винокуров, А.И. Морозов. ФТТ **55**, 2135 (2013).
 [2] Д.Л. Винокуров, А.И. Морозов. ФТТ **57**, 1736 (2015).

- [3] A.I. Morosov, A.S. Sigov. J. Magn. Magn. Mater. **383**, 242 (2015).
 [4] D. Sando, A. Agbelele, D. Rahmedov, J. Liu, P. Rovillain, C. Toulouse, I.C. Infante, A.P. Pyatakov, S. Fusil, E. Jacquet, C. Carrétero, C. Deranlot, S. Lisenkov, D. Wang, J.-M. Le Breton, M. Cazayous, A. Sacuto, J. Juraszek, A.K. Zvezdin, L. Bellaiche, B. Dkhil, A. Barthélémy, M. Bibes. Nature Mater. **12**, 641 (2013).
 [5] А.И. Морозов, А.С. Сигов. Нано- и микросистемная техника **10**, 10 (2012).
 [6] А.А. Берзин, Д.Л. Винокуров, А.И. Морозов. ФТТ **58**, 2237 (2016).
 [7] J.J. Wang, J.M. Hu, Ren-Ci Peng, Y. Gao, Y. Shen, L.Q. Chen, C.W. Nan. Sci. Rep. **5**, 10459 (2015).
 [8] G. Catalan, J.F. Scott. Adv. Matter. **21**, 2463 (2009).
 [9] Ying-Hao Chu, Lane W. Martin, Mikel B. Holcomb, Martin Gajek, Shu-Jen Han, Qing He, Nina Balke, Chan-Ho Yang, Donkoun Lee, Wei Hu, Qian Zhan, Pei-Ling Yang, Arantxa Fraile-Rodríguez, Andreas Scholl, Shan X. Wang, R. Ramesh. Nature Mater. **7**, 478 (2008).
 [10] Y. Guo, J. Wang, H. Li, P. Xu, J. Cai. Chin. Sci. Bull. **51**, 1934 (2006).
 [11] N.C. Koon. Phys. Rev. Lett. **78**, 4865 (1997).
 [12] M. Ramazanoglu, M. Laver, W. Ratcliff II, S.M. Watson, W.C. Chen, A. Jackson, K. Kothapalli, S. Lee, S.-W. Cheong, V. Kiryukhin. Phys. Rev. Lett. **107**, 207206 (2011).
 [13] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **32**, 1547 (1957).
 [14] Т. Moriya. Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
 [15] Д.Л. Винокуров. Нано- и микросистемная техника **4**, 34 (2014).
 [16] D.Y. Qiu, K. Ashraf, S. Salahuddin. Appl. Phys. Lett. **102**, 112902 (2013).
 [17] C. Bilzer, T. Devolder, J.-V. Kim, G. Council, C. Chappert. J. Appl. Phys. **100**, 053903 (2006).
 [18] J. Jeong, E.A. Goremychkin, T. Guidi, K. Nakajima, G.S. Jeon, S.-A. Kim, S. Furukawa, Y.B. Kim, S. Lee, V. Kiryukhin, S.-W. Cheong, J.-G. Park. Phys. Rev. Lett. **108**, 077202 (2012).
 [19] А.И. Морозов. ФТТ **45**, 1847 (2003).
 [20] J. Hu, Z. Li, J. Wang, C.-W. Nan. J. Appl. Phys. **107**, 093912 (2010).