

01,05

Симметричный анализ проводящих антиферромагнитных материалов CuMnAs, Mn₂Au

© А.К. Звездин^{1,2}, З.В. Гареева³

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия

² ООО „Новые спинтронные технологии“, Сколково, Москва, Россия

³ Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия

E-mail: zukhragzv@yandex.ru, zvezdin.ak@phystech.edu

Поступила в Редакцию 18 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 18 апреля 2024 г.

Принята к публикации 8 мая 2024 г.

Рассмотрены магнитные структуры и их взаимодействие со спин-поляризованными токами в проводящих антиферромагнетиках на примере CuMnAs и Mn₂Au. В рамках теоретико-группового подхода проведена классификация магнитных параметров порядка этих кристаллов по неприводимым представлениям пространственных групп симметрии D_{4h}^7 и D_{4h}^{17} . Получены инвариантные комбинации параметров порядка, определяющие энергию взаимодействия спиновых токов с вектором антиферромагнетизма.

Ключевые слова: проводящие антиферромагнетики, электрический ток, спиновый ток, симметрия.

DOI: 10.61011/FTT.2024.06.58229.42HH

1. Введение

В последние годы активное развитие получила концепция антиферромагнитной спинтроники [1–3], что связано с возможностями использования преимуществ антиферромагнитно упорядоченных материалов в современных технологиях. Устойчивость антиферромагнетиков к действию внешнего магнитного поля, высокоскоростная динамика намагниченности и хорошие транспортные свойства делают эти материалы привлекательными для применения в устройствах памяти произвольного доступа, в том числе, в качестве компонент спин-туннельных магниторезистивных элементов [4,5]. Антипараллельная ориентация спинов в антиферромагнетиках отвечает за (i) отсутствие в них полей рассеяния как следствие компенсации результирующей намагниченности кристалла; (ii) возникновение пары вращающих моментов, приводящих к высоким частотам прецессии намагниченности; высоким скоростям движения магнитных доменных границ и другим технологически важным эффектам.

Многофункциональность антиферромагнетиков также обеспечивается разнообразием электрических свойств. Классические антиферромагнетики — оксиды с антиферромагнитным (АФМ) упорядочением спинов в большинстве являются диэлектриками, в технологическом плане актуальны АФМ мультиферроидные оксиды, перспективные для использования в энергосберегающих устройствах и технологиях. Все большее внимание исследователей привлекают АФМ полуметаллы и проводники, CuMnAs, Mn₂Au, Mn₃Sn, Mn₃Ge, Mn₃Pt, преимущественно в связи с тем, что в них переключение магнитного состояния может осуществляться

под действием электрических и спин-поляризованных токов; реализуется эффект гигантского магнетосопротивления; возникают дополнительные вращательные моменты, участвующие в эффекте переноса спина; могут наблюдаться особенности аномального эффекта Холла, отсутствующего в большинстве АФМ. Серия теоретических и экспериментальных работ 2016–2019 гг. посвящена исследованию природы этих эффектов [4–12].

Проводящие антиферромагнетики открывают интересные перспективы для технологических приложений в спинтронике. В настоящей работе мы ограничимся кругом вопросов, связанных с воздействием электрических и спиновых токов на магнитную структуру проводящих антиферромагнетиков, что является актуальным аспектом для реализации антиферромагнитной многоуровневой памяти [13]. Для определённости рассмотрим антиферромагнетики CuMnAs и Mn₂Au, электронная структура, магнитные и транспортные свойства которых активно исследовались в течении последних лет [5,6,14,15] в связи с работами по высокоскоростной динамике доменных границ [7,16].

Цель работы состоит в изучении возможностей оптимизации магниторезистивных эффектов в спин-туннельных устройствах, в которых в качестве свободного магнитного слоя используется проводящий антиферромагнетик. Для решения данной задачи необходимо изучить магнитные состояния, которые могут быть реализованы в свободном слое антиферромагнетика под действием спинового тока, протекающего, например, через туннельный контакт, разделяющий слой поляризатора и свободный слой магниторезистивного устройства. Используя методы теоретико-группового анализа

определим магнитные конфигурации, реализуемые в антиферромагнетиках тетрагональной симметрии, проанализируем эффекты, связанные с действием зарядовых и спиновых токов.

2. Спиновые токи. Постановка задачи

Задача о магнитных состояниях в антиферромагнетике, возникающих вследствие действия спин-поляризованных токов может быть решена с использованием техники Лагранжева формализма, функция Лагранжа и диссипативная функция Рэля имеют вид [17,18]

$$L = \chi_{\perp} \dot{\mathbf{l}}^2 / 2\gamma^2 - \chi_{\perp} \mathbf{H}[\mathbf{l} \times \dot{\mathbf{l}}] / \gamma - \Phi - W, \quad (1)$$

$$R = \alpha M_0 \dot{\mathbf{l}}^2 / 2\gamma,$$

где γ — гиромагнитное отношение, α — параметр затухания, \mathbf{l} — единичный вектор антиферромагнетизма, Φ — термодинамический потенциал системы, W — плотность энергии, связанной с вращательными моментами, действующими со стороны спин-поляризованных токов.

Спин-поляризованные токи — токи, связанные с процессами переноса спина, определяются соотношениями вида

$$\mathbf{j}_{\sigma} = \sum_i V_i \otimes \mathbf{s}_i, \quad |\mathbf{j}_{\sigma}| = p \frac{\hbar s}{e} J, \quad (2)$$

где $p = (N_+ - N_-) / (N_+ + N_-)$ — поляризация по спину, N_{\mp} — число электронов со спином $s = \mp 1/2$.

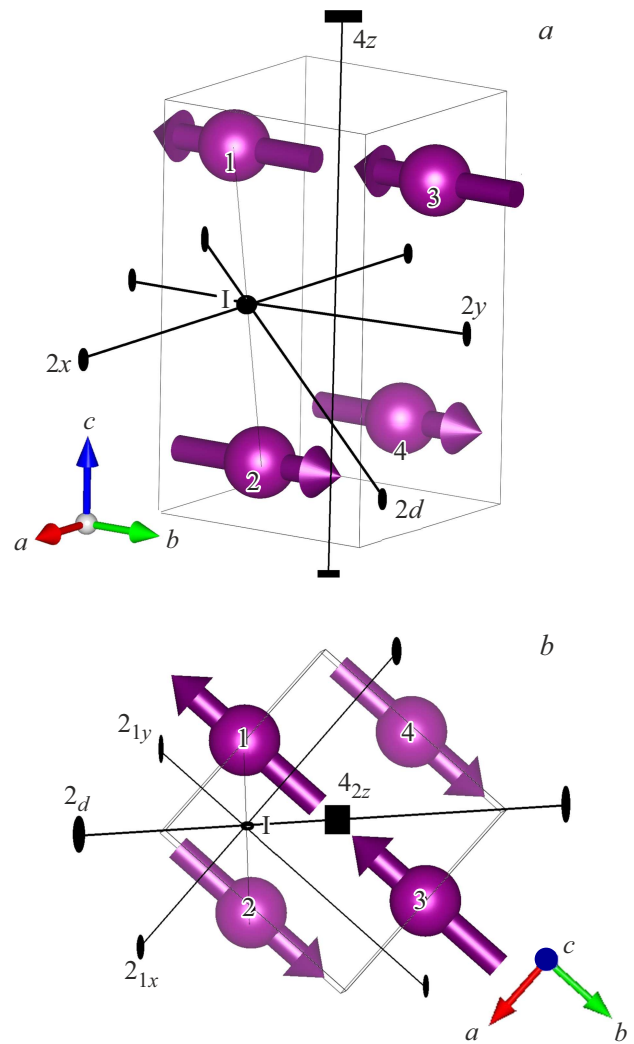
Особенностью спиновых токов с точки зрения симметрии, является то, что спиновый ток не меняет знак при инверсии времени, при этом он также как и электрический ток изменяет знак при пространственной инверсии ($z \rightarrow -z, y \rightarrow -y, x \rightarrow -x$). Спиновые токи могут быть двух типов: (i) инжекционные токи j_{ij}^s , используемые в спинтронике в многослойных наноструктурах в экспериментах типа STT (за счет эффекта передачи углового момента) или спин-Холл-эффектов, (ii) спиновые токи, как часть спин-поляризованного тока, возникающего согласно идее Мотта в магнитоупорядоченных материалах. При этом зарядовый ток может возникать за счет внешней разницы потенциалов, градиента температуры и градиента концентрации. Примером являются спиновые токи, обусловленные эффектом Зеебека

$$\mathbf{J}_s^T = -\frac{\hbar}{2e} \sigma \nabla T,$$

σ — коэффициент Зеебека [19].

3. Магнитная структура проводящих антиферромагнетиков. CuMnAs, Mn₂Au

Рассмотрим кристаллическую структуру и магнитные свойства антиферромагнетиков CuMnAs и Mn₂Au. В



a — элементарная ячейка CuMnAs; *b* — проекция ячейки на плоскость *ab*, положение основных элементов симметрии.

элементарных ячеек кристаллов CuMnAs и Mn₂Au содержатся четыре молекулы CuMnAs и Mn₂Au, кристаллическая структура CuMnAs и Mn₂Au описывается пространственными группами симметрии D_{4h}^7 и D_{4h}^{17} соответственно. В том и другом случаях ионы Mn^{3+} занимают позиции $4c$ в нотации Вайкопфа. Группы D_{4h}^7 и D_{4h}^{17} содержат набор из 16 операций симметрии, из которых можно выделить независимые элементы 4_{2z}^+ , 2_d , $\bar{1}$ в качестве генераторов группы. В дальнейшем, для иллюстрации рассмотрим антиферромагнетик CuMnAs, вследствие симметрии полученные результаты будут справедливы и для Mn₂Au.

Расположение элементов симметрии — винтовых осей второго порядка 2_{1y} , 2_{1y} , винтовой оси четвертого порядка 4_{2z}^+ , оси второго порядка 2_d и инверсии $\bar{1}$ в элементарной ячейке CuMnAs, а также на ее проекции на плоскость, перпендикулярную главной оси кристалла 4_{2z}^+ , показано на рисунке. Ионы Mn^{2+} занимают двукратные позиции $2c\{4mm\}$ с координатами: $(0, 1/2, z) = (0, 0.50, 0.16402)$.

Таблица 1. Перестановочные преобразования ионов Mn^{3+} и базисных векторов под действием генераторов группы G_F

G_F	1	2	3	4	G_F	F	A	G	C
$\bar{1}$	2	1	4	3	$\bar{1}$	F	$-A$	$-G$	C
4_{2z}^+	4	3	2	1	4_{2z}^+	F	$-A$	$-G$	$-C$
2_d	2	1	4	3	2_d	F	$-A$	$-G$	C

С кристаллической структурой связан характер магнитного упорядочения. Согласно нейтронографическим данным [20] ионы Mn^{3+} в $CuMnAs$ образуют антиферромагнитно-упорядоченную структуру G -типа при температурах $T = 330-360$ К. В качестве магнитных параметров порядка введем базисные вектора магнитных подрешеток

$$\begin{aligned} F &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4, \\ A &= \mu_1 - \mu_2 - \mu_3 + \mu_4, \\ G &= \mu_1 - \mu_2 + \mu_3 - \mu_4, \\ C &= \mu_1 + \mu_2 - \mu_3 - \mu_4. \end{aligned} \quad (3)$$

Поскольку магнитные моменты ионов одинаковы по величине $|\mu_1| = |\mu_2| = |\mu_3| = |\mu_4|$, $\mu_1 \uparrow\uparrow \mu_3$, $\mu_2 \uparrow\uparrow \mu_4$, $\mu_1 \uparrow\downarrow \mu_2$, $\mu_3 \uparrow\downarrow \mu_4$, удобно перейти к приближению двух-подрешеточного магнетика

$$M = \frac{1}{2M_0} (M_1 + M_2), \quad L = \frac{1}{2M_0} (M_1 - M_2), \quad (4)$$

где M_0 — величина намагниченности подрешетки, $M_1 = \mu_1 + \mu_3$, $M_2 = \mu_2 + \mu_4$.

Из генераторов группы составим код позиции, указав перестановочные свойства ионов в соответствии с рисунком

$$\bar{1} \begin{pmatrix} 1-2 \\ 3-4 \end{pmatrix} 4_{2z}^+ \begin{pmatrix} 1-4 \\ 2-4 \end{pmatrix} 2_d \begin{pmatrix} 1-2 \\ 3-4 \end{pmatrix}.$$

В табл. 1 показано, как преобразуются положения ионов и трансформируются базисные вектора под действием генераторов группы D_{4h}^7 .

С помощью табл. 1 получим шифр (индексы Турова) для АФМ вектора G :

$$\bar{1}(-)4_{2z}^+(-)2_d(-). \quad (5)$$

Используя шифр (5), классифицируем вектора ферро- и антиферромагнетизма (M и L), являющиеся параметрами магнитного упорядочения $CuMnAs$, а также компоненты спинового (J_s) и зарядового токов (J) по неприводимым представлениям группы симметрии кристалла (табл. 2). Отметим, что индексы i и j в тензоре спинового тока j_{ij}^s связаны с компонентами электрического тока J_i и намагниченности M_j , при этом действие операций симметрии 4_{2z}^+ и 2_d таково, что $j_{ij}^s = j_{ji}^s$.

В качестве базисных функций для неприводимых представлений Γ_i ($i = 1-10$) могут быть взяты в различных ситуациях как четные, так и нечетные величины по отношению к инверсии по времени, например, J и E . Мы полагаем, что в зависимости от конкретной физической ситуации такая дихотомия не вызовет затруднений у читателя.

Рассмотрим взаимодействие спиновых токов с компонентами антиферромагнитного вектора L . Из табл. 2, используя операции перемножения неприводимых пред-

Таблица 2. Неприводимые представления (НП) группы D_{4h}^7 и базисные функции

	$\bar{1}$	4_{2z}^+	2_d	M_i, L_i	J_{ij}^s
Γ_1	1	1	1	$L_x^2 + L_y^2$	
Γ_2	1	1	-1	M_z, H_z	
Γ_3	-1	-1	1	L_z	$j_{xy}^s + j_{yx}^s$
Γ_4	-1	1	-1	J_z, E_z	
Γ_5	-1	1	1		$J_{zz}^s, J_{xx}^s + J_{yy}^s$
Γ_6	-1	-1	-1	$M_z L_z$	$J_{xx}^s - J_{yy}^s$
Γ_7	1	-1	1	$M_z L_z J_z$	
Γ_8	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} M_x \\ M_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \end{pmatrix}$	
Γ_9	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} L_x \\ L_y \end{pmatrix}$	
Γ_{10}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$	
Γ_{11}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} J_{zx}^s \\ J_{zy}^s \end{pmatrix}$

ставлений, можно получить следующие выражения для энергии взаимодействия спиновых токов с компонентами вектора \mathbf{L}

$$W = a_1(J_{xz}^s L_y + J_{yz}^s L_x) + a_2(J_{zx}^s L_y + J_{zy}^s L_x) + a_3(J_{xy}^s L_z + J_{yx}^s L_z) + a_4(J_{xx}^s - J_{yy}^s)H_z L_z. \quad (6)$$

Для изучения спиновой динамики нужна квадратичная форма, составленная из компонент векторов $\mathbf{L}, \mathbf{M}, \mathbf{H}, \mathbf{E}$, определяющая полный термодинамический потенциал системы, который включает в себя обменную энергию, энергию анизотропии, зеемановскую энергию и магнитоэлектрическую энергию. Она также может быть построена с помощью табл. 2.

$$\Phi = a\mathbf{M}^2 + c_1(L_x^2 + L_y^2) + c_2L_z^2 + d(\mathbf{M} \cdot \mathbf{L})^2 + g_1L_z(M_x E_y + M_y E_x) + g_2M_z(L_x E_y + L_y E_x) + g_3E_z(L_y M_x + L_x M_y). \quad (7)$$

Выражение вида (6) можно рассматривать в качестве компоненты общей теории (схемы) исследования физических свойств антиферромагнетиков, разработанной советскими учеными Дзялошинским, Боровиком–Романовым, Туровым [21–27] (см. также гл. 14 в [27]), основанной на использовании пространственных групп симметрии кристаллов. Эту схему, т.е. формулы (1), (6), (7) можно применить для анализа спиновой динамики проводящих антиферромагнетиков, которая в последние годы широко изучается.

До сих пор наблюдаемые особенности динамики антиферромагнитных спиновых систем CuMnAs и Mn₂Au [4–8,12,16] объяснялись в рамках концепции NSOT — неелевского спин — орбитального вращающего момента, полученной авторами работ [6,8,12,16] на основе микроскопического рассмотрения.

Представленный в настоящей работе подход позволяет исследовать спиновую динамику проводящих антиферромагнетиков с более общих позиций, так как он основан на использовании пространственной симметрии этих материалов. Мы полагаем, что этот подход может оказаться полезным дополнением к упомянутым выше пионерским работам. В этом кратком сообщении мы не ставим задачу полностью развить эту теорию. Укажем только, что, используя рассмотренную выше квадратичную форму термодинамического потенциала и подставляя ее в Лагранжиан системы (1) с учетом (6) и (7), мы получаем законченную схему описания спиновой динамики проводящих антиферромагнетиков в рамках симметричного подхода.

Финансирование работы

Работа поддержана грантом Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение № 075-11-2022-046.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, Y. Tserkovnyak. *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
- [2] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, J. Wunderlich. *Nature Nanotech.* **11**, 3 (2016).
- [3] O. Gomonay, T. Jungwirth, J. Sinova. *Phys. Status Solidi — Rapid Res. Lett.* **11**, 1700022 (2017).
- [4] P. Wadley, S. Reimers, M.J. Grzybowski, C. Andrews, M. Wang, J.S. Chauhan, B.L. Gallagher, R.P. Campion, K.W. Edmonds, S.S. Dhesi, F. Maccherozzi, V. Novak, J. Wunderlich, T. Jungwirth. *Nature Nanotech.* **13**, 362 (2018).
- [5] P. Wadley, B. Howells, J. Zelezny, C. Andrews, V. Hills, R.P. Campion, V. Novak, K. Olejnik, F. Maccherozzi, S.S. Dhesi, S.Y. Martin, T. Wagner, J. Wunderlich, F. Freimuth, Y. Mokrousov, J. Kuneš, J.S. Chauhan, M.J. Grzybowski, A.W. Rushforth, K.W. Edmonds, B.L. Gallagher, T. Jungwirth. *Science* **351**, 587 (2016).
- [6] J. Godinho, H. Reichlová, D. Kriegner, V. Novák, K. Olejnik, Z. Kašpar, Z. Šobáň, P. Wadley, R.P. Campion, R.M. Otxoa, P.E. Roy, J. Železný, T. Jungwirth, J. Wunderlich. *Nature Commun.* **9**, 4686 (2018).
- [7] M.J. Grzybowski, P. Wadley, K.-W. Edmonds, R. Beardsley, V. Hills, R.-P. Campion, B.-L. Gallagher, J.-S. Chauhan, V. Novak, T. Jungwirth, F. Maccherozzi, S.-S. Dhesi. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 057701 (2017).
- [8] L. Baldrati, O. Gomonay, A. Ross, M. Filianina, R. Lebrun, R. Ramos, C. Leveille, F. Fuhrmann, T.-R. Forrest, F. Maccherozzi, S. Valencia, F. Kronast, E. Saitoh, J. Sinova, M. Kläui. *Phys. Rev. Lett.* **123**, 177201 (2019).
- [9] A. Manchon, J. Železný, I.M. Miron, T. Jungwirth, J. Sinova, A. Thiaville, K. Garello, P. Gambardella. *Rev. Mod. Phys.* **91**, 035004 (2019).
- [10] T. Shiino, S.-H. Oh, P.M. Haney, S.-W. Lee, G. Go, B.-G. Park, K.-J. Lee. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 087203 (2016).
- [11] H. Van den Berg, W. Clemens, G. Gieres, G. Rupp, W. Schelter, M. Vieth. *IEEE Transact. Magn.* **32**, 4624 (1996).
- [12] O. Gomonay, T. Jungwirth, J. Sinova. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 017202 (2016).
- [13] K. Olejnik, V. Schuler, X. Marti, V. Novák, Z. Kašpar, P. Wadley, R.P. Campion, K.W. Edmonds, B.L. Gallagher, J. Garces, M. Baumgartner, P. Gambardella, T. Jungwirth. *Nature Commun.* **8**, 1 (2017).
- [14] P. Wadley, V. Novák, R.P. Campion, C. Rinaldi, X. Martí, H. Reichlová, J. Železný, J. Gazquez, M.A. Roldan, M. Varela, D. Khalayavin, S. Langridge, D. Kriegner, F. Máca, J. Mašek, R. Bertacco, V. Holý, A.W. Rushforth, K.W. Edmonds, B.L. Gallagher, C.T. Foxon, J. Wunderlich, T. Jungwirth. *Nature Commun.* **4**, 1 (2013).
- [15] J. Volný, D. Wagenknecht, J. Železný, P. Hrabec, E. Duverger-Nedellec, R.H. Colman, J. Kudrnovský, I. Turek, K. Uhlířová, K. Výborný. *Phys. Rev. Mater.* **4**, 064403 (2020).
- [16] J. Železný, P. Wadley, K. Olejnik, A. Hoffmann, H. Ohno. *Nature Phys.* **14**, 3 (2018).
- [17] А.Ф. Андреев, В.И. Марченко. *Успехи физических наук.* **130**, 1, 39 (1980).
- [18] А.К. Звездин, А.А. Мухин, *Краткие сообщ. по физике, ФИАН* **12**, 10 (1981).

- [19] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibaе, K. Ando, S. Maekawa, E. Saitoh. Nature **455**, 7214 (2008).
- [20] J. Mündelein, H.-U. Schuster. Z. Naturforschung B **47**, 925 (1992).
- [21] Е.А. Туров, В.В. Николаев. УФН **175**, 457 (2005).
- [22] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **46**, 1420 (1964).
- [23] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **19**, 960 (1964).
- [24] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **20**, 223(1965)
- [25] А.С. Боровик-Романов. Лекции по низкотемпературному магнетизму. Ин-т физ. проблем им. П.Л. Капицы РАН, М. (2010). 55 с.
- [26] Е.А. Туров, А.В. Колчанов, В.В. Меньшенин, И.Ф. Мирсаев, В.В. Николаев. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. Физматлит, М. (2001). 559 с.
- [27] А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. Наука, М. (1985). 295 с.

Редактор Т.Н. Василевская