

УДК 538.91, 537.61

MSC2010 65C05

© В. Ю. Капитан^{1,2}; Е. В. Васильев^{1,2}; Ю. А. Шевченко^{1,2}; А. В. Пержу^{1,2};
Д. Ю. Капитан^{1,2}; А. Е. Рыбин^{1,2}; К. С. Солдатов^{1,2}; А. Г. Макаров^{1,2};
Р. А. Волоотовский^{1,2}; К. В. Нефедев^{1,2}

Термодинамические свойства систем спинов Гейзенберга на квадратной решетке с взаимодействием Дзялошинского – Мория

В работе представлены результаты численного моделирования термодинамических свойств массива классических спинов Гейзенберга, размещенных на двумерной квадратной решетке. Используя методы Метрополиса и Ванга – Ландау, мы рассматриваем температурное поведение системы с конкурирующими взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского – Мория (ДМ) в сравнении с классической системой Гейзенберга. Показан процесс формирования скирмионов в зависимости от величины внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: *численное моделирование, термодинамика, модель Гейзенберга, алгоритм Метрополиса, алгоритм Ванга – Ландау, взаимодействие Дзялошинского – Мория, скирмион.*

Вступление

Свойства магнитных пленок являются объектами интенсивных исследований. Особый интерес представляет возможность использования ферромагнитных пленок в микроэлектронике и компьютерной технике в качестве магнитных носителей для записи и хранения информации. Активные исследования в этой области могут увеличить плотность записи информации и длительность хранения устройств. Энергоэффективные хранилища данных со сверхвысокой плотностью записи являются следующим этапом в разработке устройств хранения. Более того, изучение физических свойств магнитных пленок имеет фундаментальное значение для определения развития как физики магнитных явлений, так и физики поверхности.

Методы Монте-Карло численного статистического описания систем широко используются для изучения термодинамических и магнитных свойств различных материалов [1–4]. В методах Монте-Карло случайный процесс заменяет точную динамику частиц, позволяя вычислять средние значения различных физических величин

¹ Дальневосточный федеральный университет, 690950, г. Владивосток, ул. Суханова, 8.

² Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.

Электронная почта: kapitan.vyu@dvfu.ru (В. Ю. Капитан).

в рамках канонического ансамбля. Моделирование по методу Монте-Карло зарекомендовало себя как мощный инструмент для систематического изучения магнитных наносистем, особенно при изучении фазовых переходов и магнитных явлений [5–9]. Моделирование методом Монте-Карло широко используется во многих областях, таких как физика высоких энергий, химия, математика, экономика, нейронные сети и социальные науки.

Ниже представлены результаты компьютерного моделирования магнитных двумерных решеточных систем с прямым и ДМ-взаимодействием. Мы показали процесс формирования скирмионов в зависимости от величины внешнего магнитного поля.

1. Модели и методы

Модель Гейзенберга является одной из моделей статистической физики и предназначена для моделирования ферромагнетизма. Применяется при исследовании критических точек и фазовых переходов различных магнитных систем. Мы использовали решеточный гамильтониан, состоящий из обменного гамильтониана Гейзенберга (H_J) и гамильтониана ДМ-взаимодействия (H_D), для микроскопического описания кирального гелимагнетика [10–12] (см. формулы (1)–(3)).

В 1960 году Дзялошинский представил модель для описания слабого ферромагнетизма [13]. На основе теории симметрий он ввел асимметричный термин, который позже был разъяснен Морией. Мория обнаружил, что механизм этого взаимодействия частично основан на спин-орбитальной связи [14]. Взаимодействие Дзялошинского – Мории (ДМ-взаимодействие) представляет собой микроскопическую характеристику взаимодействующих спинов, возникающую в системе, в которой отсутствует инверсионная симметрия, и имеющую сильную спин-орбитальную связь. Мы используем гамильтониан

$$H = (H_J + H_z) + H_D, \quad (1)$$

$$H_J = -J \sum_r \vec{S}_r \cdot (\vec{S}_{r+\hat{x}} + \vec{S}_{r+\hat{y}}) - H_z \sum_r \vec{S}_r, \quad (2)$$

$$H_D = -D \sum_r \vec{S}_r \times \vec{S}_{r+\hat{x}} \cdot \hat{x} + \vec{S}_r \times \vec{S}_{r+\hat{y}} \cdot \hat{y}, \quad (3)$$

где \vec{S}_r – атомный спин, $J=1$ – ферромагнитное короткодействующее обменное взаимодействие, ДМ-взаимодействие $D=0.6J$ [8, 9].

Формулы (2) и (3) используются для расчета взаимодействия между \vec{S}_r и его соседями вдоль оси X и оси Y на двумерной решетке. При расчете полной энергии системы учитываются только взаимодействия пар уникальных соседей, стоящих «выше» вдоль оси Y и «правее» вдоль оси X .

Спин $\vec{S} = \{S^x; S^y; S^z\}$ вводится как трехмерный вектор единичной длины в соответствии с формулами

$$S^x = \sin(\varphi) \cos(\vartheta),$$

$$S^y = \sin(\varphi) \sin(\vartheta),$$

$$S^z = \cos(\varphi),$$

где $\varphi = [0; \pi]$, $\vartheta = [0; 2\pi]$.

В рамках нашей компьютерной модели магнитная пленка имеет размер $N = L \times L$. Магнитная пленка, представляющая собой систему спинов Гейзенберга, размещается в узлах двумерной квадратной решетки, где спин имеет четыре ближайших соседа в пленке (*с периодическими граничными условиями*).

2. Алгоритмы и реализация

В работе применяется модифицированный алгоритм Метрополиса: используется наш вариант симуляции Multipath Metropolis (ММ), основанный на [15]. В отличие от стандартного алгоритма с одним путем алгоритм Метрополиса, применяемый к нескольким путям случайного обхода, изначально лучше для распараллеливания. Основным преимуществом многолучевого подхода, при моделировании спиновых систем алгоритмом Метрополиса, является использование независимого пути случайного блуждания для получения некоррелированных результатов моделирования с нормальным распределением, все это позволяет проводить строгий статистический анализ полученных данных.

Параметры алгоритма Multipath Metropolis представляют собой 10^3 путей случайного обхода, каждый путь состоит из 2×10^6 шагов Монте-Карло для термализации, затем 2×10^6 шагов Монте-Карло для основного цикла расчета.

Несмотря на все достоинства, у ММ есть некоторые недостатки. Первый — это критическое замедление в момент, когда нам нужно экспоненциально увеличивать количество шагов, чтобы получить истинные термодинамически усредненные значения. Это появляется вблизи критической температуры системы. Вторым недостатком — заклинивание в локальных минимумах энергии. Оно возникает для так называемых расстроенных систем, в которых истинное основное состояние недостижимо из-за конкурирующих взаимодействий между спинами.

Чтобы преодолеть эти недостатки, в дополнение к ММ мы использовали алгоритм Ванга – Ландау (ВЛ) [16], который вычисляет непосредственно плотность состояний (*гистограмма DOS или $g(E)$*), её можно использовать для построения функции разделения Z . Эта функция Z может использоваться для термодинамического усреднения любых значений, таких как параметр порядка, намагниченность, теплопроизводительность, восприимчивость, энергия и так далее.

В алгоритме ВЛ случайный обход в энергетическом пространстве выполняется с вероятностью, пропорциональной обратной величине DOS, $1/g(E)$, что приводит к плоской гистограмме распределения энергии. Пробный переход с энергетического уровня E_1 на E_2 сделан с вероятностью

$$p(E_1 \rightarrow E_2) = \min\left[1, \frac{g(E_1)}{g(E_2)}\right].$$

Поскольку точная форма $g(E)$ априори неизвестна, мы определяем $g(E)$ итеративно, вводя коэффициент модификации f_i . Затем каждый раз, когда состояние с энергией E посещается алгоритмом, $g(E)$ модифицируется

$$\ln g(E) \rightarrow \ln g(E) + \ln f_i.$$

В то же время гистограмма энергии $h(E)$ обновляется как

$$h(E) \rightarrow h(E) + 1.$$

Это обновление продолжается до тех пор, пока $h(E)$ не удовлетворяет критериям плоскостности, то есть каждое значение $h(E)$ составляет не менее 80% от среднего значения $\langle h(E) \rangle$. Затем мы повторяем выборку с уменьшенным коэффициентом модификации согласно правилу

$$\ln f_{i+1} = \frac{1}{2} \ln f_i.$$

и сбрасываем гистограмму $h(E)$. В качестве начального значения f_i мы выбираем $f_0 = e$; в качестве окончательного значения мы выбираем $\ln f_i = 2^{-22}$, то есть $f_{22} \simeq 1.00000024$. Критерии плоскостности, равные 80%, предложены авторами алгоритма [16] и идеально подходят для моделей Изинга, но для нашего случая с непрерывной гистограммой это значение уменьшается до 70%.

В отличие от модели Изинга, спин Гейзенберга имеет непрерывное пространство состояний, а без ДМ-взаимодействия система таких спинов имеет бесконечное число основных состояний. Это означает, что $g(E_{gs}) = \infty$, и алгоритм ВЛ никогда не будет сходиться. Чтобы решить эту проблему, мы ограничили возможные ориентации \vec{S} , определив набор из 100 равномерно распределенных точек на единичной сфере. Распределение производится по алгоритму Дезерно [17], который гарантирует, что все расстояния между двумя соседними точками равны. Мы генерируем каждую новую конфигурацию, выбирая случайную точку из заранее определенного набора. Этот подход делает значение $g(E_{gs})$ конечным и равным 100.

Другой проблемой является непрерывный характер $h(E)$ и $g(E)$. Чтобы сделать его считаемым, мы разделили пространство энергии между E_{min} и E_{max} на ячейки так, чтобы каждая ячейка имела размер $1J$.

Термодинамическое среднее любой физической величины A при обратной температуре $\beta = 1/T$ рассчитывается на основе знания энергии DOS как

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\sum_E e^{-\beta E} A(E) g(E)}{\sum_E e^{-\beta E} g(E)}.$$

Затем удельная теплоемкость рассчитывается по соотношению

$$C = \frac{d\langle E \rangle_\beta}{dT} = \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle_\beta - \langle E \rangle_\beta^2 \right).$$

Поскольку вычисление A требует получения дополнительной информации для каждого E при выборке, мы вынуждены рассчитывать двухмерные гистограммы $g(E, A)$ и $h(E, A)$, которые значительно увеличивают сложность вычисления и делают практически невозможным вычисление даже нашей сравнительно небольшой системы. Мы получаем только значения $\langle E \rangle(T)$ и $C(T)$, которые не требуются для получения совместного DOS.

Мы делаем 150 независимых прогонов с различными случайными начальными значениями для каждого случая, чтобы дополнительно получить статистическое среднее по $\langle E \rangle$ и C для каждой точки на графике. Error bars также представлены.

3. Результаты и обсуждения

3.1. Сравнение результатов ВЛ- и ММ-алгоритмов

Приведены смоделированные данные двумерной решетки спинов ФМ Гейзенберга с 4 ближайшими соседями, имеющими только прямой обмен ($D=0$). Размер системы был $N=8\times 8$. Мы начали моделирование из конфигурации GS , в которой все спины сонаправлены. Энергия этой конфигурации $E_{GS} = -2NJ$.

Мы вычислили температурную зависимость средней энергии спина, где конфигурация GS появляется чаще при $T \rightarrow 0$. Здесь $\langle E \rangle_{T=0.05J} = -1.96(2)$ для ВЛ и $\langle E \rangle_{T=0.05J} = -1.95(1)$ для ММ. Средняя энергия выражает максимальный наклон при $T \approx 0.8J$. Мы вычислили температурную зависимость средней намагниченности спина. В основном состоянии все спины сонаправлены, и общая намагниченность будет стремиться к $\langle M \rangle_{T \rightarrow 0} = 1N$, здесь $\langle M \rangle_{T=0.05J} = -0.98(1)$ для ММ. Так же как и энергия, намагниченность выражает максимальный наклон при $T \approx 0.8J$.

На рисунке 1 показана температурная зависимость теплоемкости действующей на спин. Она достигает максимального значения $C = 1.65(7)N$ (ВЛ) при $T_c = 0.7685J$. Ближайшая точка для ММ также является максимальным значением $C = 1.59(6)N$ для $T = 0.75J$. Пик очень хорошо согласуется с независимыми результатами из [18].

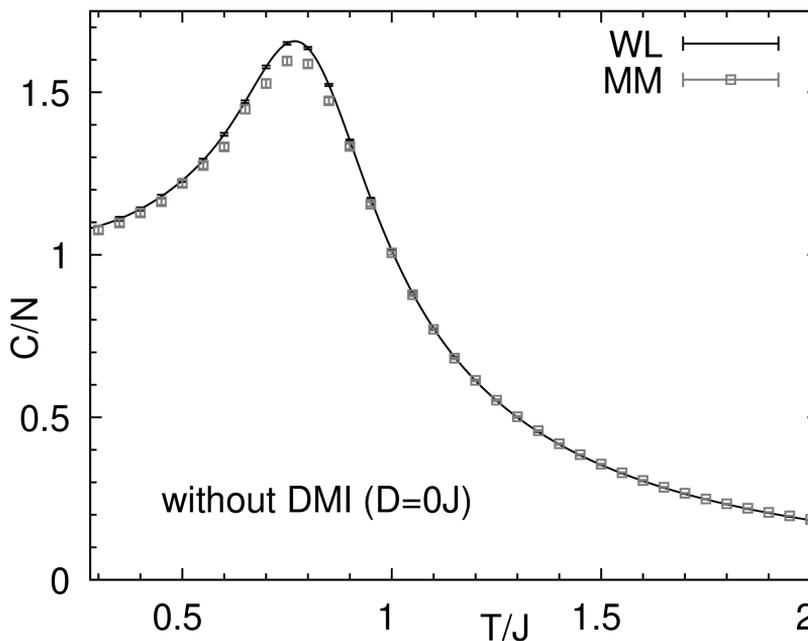


Рис. 1. Теплоемкость системы в спиновой модели Гейзенберга на квадратной решетке без ДМ-взаимодействия ($J = 1$, $D = 0$). Данные рассчитаны методами ММ и ВЛ. Размер системы составляет $N = 64$ спина.

Когда правильность параметров моделирования доказана, мы добавляем ДМ-взаимодействие как $D = 0.6J$. В отличие от простого обмена Гейзенберга, который коллинеарно выравнивает соседние спины, обмен ДМ сводит энергию к минимуму, выравнивая спины перпендикулярно друг другу вдоль радиуса-вектора. Отношение D/J контролирует отклонение между коллинеарным и перпендикулярным совмещением.

На рисунке 2 показана одна из низкоэнергетических конфигураций, которая появляется при низкотемпературном отборе проб. Основное состояние подчиняется правилу, когда вся выборка делится на вертикальные или горизонтальные линии, а спины сонаправлены по линии. При $D = 0.6J$ спины в соседних линиях имеют угол $\approx \pi/4$ и каждая 8-я линия имеет одинаковое направление. Это неожиданное пове-

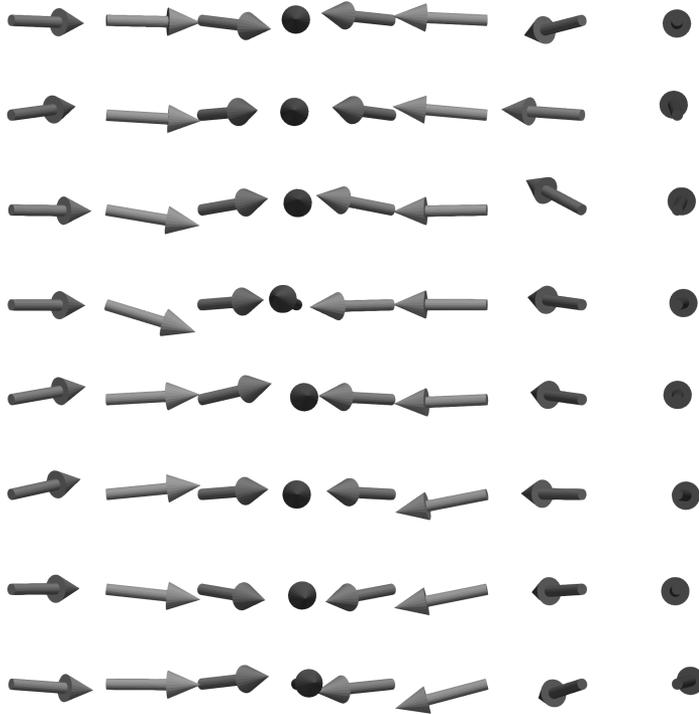


Рис. 2. Одна из конфигураций основного состояния спиновой модели Гейзенберга на квадратной решетке с ДМ-взаимодействием ($J = 1$, $D = 0.6$), возникающая при $T \rightarrow 0$. Соответствующая энергия $E \approx -2.05NJ$. Размер системы составляет $N = 64$ спина. Цвет представляет собой функцию координаты z между -1 (белый) и $+1$ (черный)

дение, потому что член ДМ-взаимодействия в уравнении должен отклоняться от соседних спинов по радиусному вектору, но на рисунке 4 мы видим, что отклонение только по одной из двух осей энергетически выгодно.

Энергия этой конфигурации стремится к $-2.1N$, это значение немного меньше, чем для случая, когда $D=0$. На рисунке 5 показана температурная зависимость энергии, действующей на спин. Поведение почти такое же, за исключением того, что температура максимального образования энергии равна $0.69J$. В отличие от случая $D=0$, когда в основном состоянии система имеет максимально возможную намагниченность, здесь общая намагниченность стремится к 0. Кривая намагничивания выражает максимальный наклон при $T \approx 0.8J$.

На рисунке 3 показана температурная зависимость теплоемкости, действующей на спин. Максимальное значение достигается при $C = 1.39(2)N$ (ВЛ) при $T_c = 0.693J$. В ММ кривая $C(T)$ достигает максимального значения $C = 1.36(8)N$ при $T_c = 0.65$. Это отклонение вызвано критическим эффектом замедления ММ.

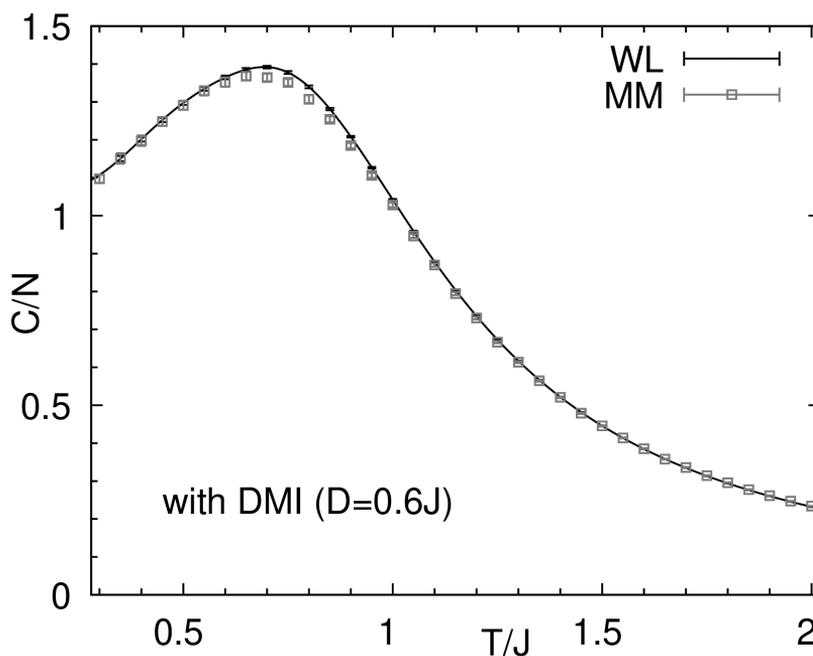


Рис. 3. Теплоемкость системы в спиновой модели Гейзенберга на квадратной решетке с ДМ-взаимодействием ($J = 1, D = 0.6$). Данные рассчитаны методами ММ и ВЛ. Размер системы составляет $N = 64$ спина.

3.2. Формирование скирмионов

Ниже, используя алгоритм Multipath Metropolis, мы покажем шаг за шагом процесс зарождения скирмиона и скирмионной решетки. Упомянутый процесс зависит от величины внешнего неплоского магнитного поля. Параметры моделирования были: $\mathbf{D} = \mathbf{J} = \mathbf{1}$, размер системы был $\mathbf{N} = 20 \times 20$. Визуализация была сделана в Paraview [19].

На рисунке 4 мы показываем полосовую структуру системы, образовавшуюся из-за конкуренции прямого гейзенберговского обмена и взаимодействия ДМ, как на рисунке 2. Но на рис. 4 изображено более одной прокрутки в одной полосе, это результаты прямого спин-спинового взаимодействия. Внешнее магнитное поле равно нулю.

На рисунке 5, когда мы добавляем небольшое внешнее магнитное поле $\mathbf{H}_z = 0.1$, мы видим начало процесса зарождения скирмиона. Под воздействием внешнего магнитного поля в полосах образуется скирмион, и в целом мы можем наблюдать изменение в распределении конфигурации магнитного спина. И наконец, когда мы применяем $\mathbf{H}_z = 0.5$, мы получаем решетку скирмионов, изображенную на рисунке 6.

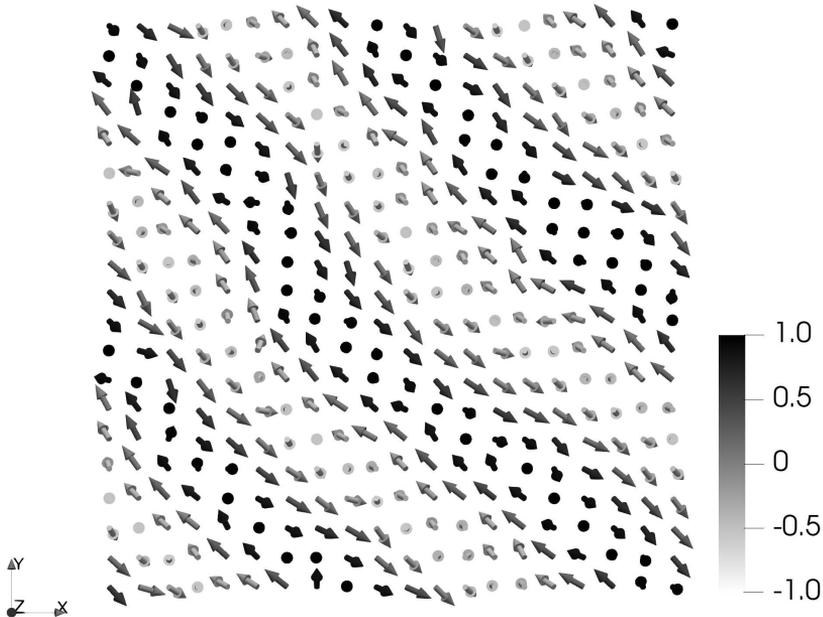


Рис. 4. Полосовая структура

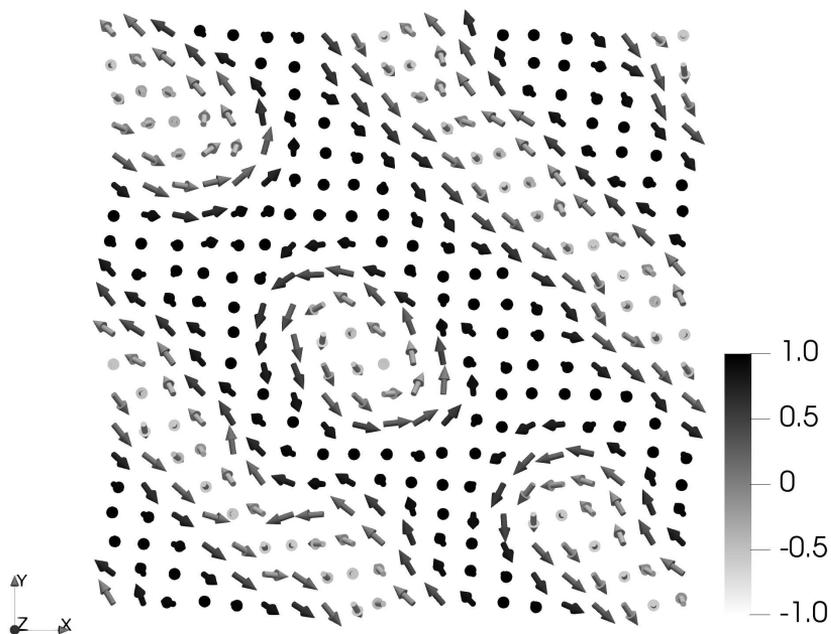


Рис. 5. Смешанное состояние

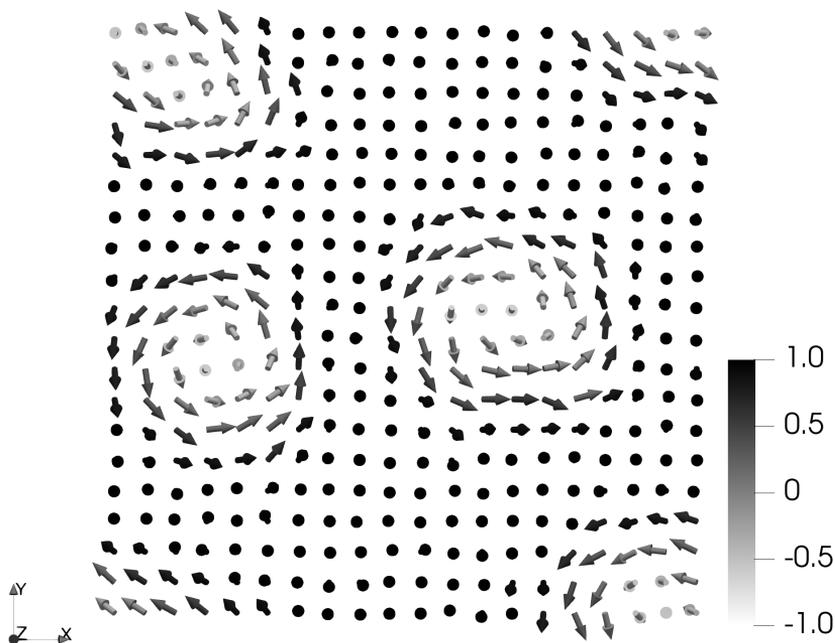


Рис. 6. Скирмионная решетка

Заключение

В рамках классической модели Гейзенберга решеточные спиновые системы с прямыми короткими взаимодействиями и взаимодействием Дзялошинского – Мории были исследованы методами Монте-Карло (алгоритм Метрополиса с множественными случайными блужданиями и алгоритм Ванга – Ландау). Энергия прямого взаимодействия, которая способствует коллинеарному выравниванию соседних спинов и управляет упорядочением в системе, определяется обменным интегралом Гейзенберга. Гораздо более слабое взаимодействие, благоприятствующее перпендикулярной ориентации соседних спинов, существует в некоторых гейзенберговских магнитах, в которых электроны имеют сильную спин-орбитальную связь. Энергия этого взаимодействия описывается ДМ-взаимодействием, которое приводит к тому, что спины отклоняются от параллельной ориентации. В результате возникает конкуренция между коллинеарным и неколлинеарным выравниванием спинов. Термодинамические характеристики, такие как температурное поведение намагниченности, энергии и теплоемкости, показали эти различия. Отношение D/J контролирует отклонение между коллинеарным и перпендикулярным совмещением. Был показан процесс зарождения скирмионов в зависимости от величины внешнего магнитного поля.

Список литературы

- [1] B. Heinrich, J. A. C. Bland, “Ultrathin magnetic structures”, *II: Measurement techniques and novel magnetic properties Vol. 2*, Springer Science & Business Media, 2006.
- [2] V. Belokon, V. Kapitan, O. Dyachenko, “The combination of the random interaction fields’ method and the Bethe–Peierls method for studying two-sublattice magnets”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **401**, (2016), 651–655.
- [3] V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, D. E. Romanovskii, “Monte Carlo simulation of multilayer magnetic structures and calculation of the magnetoresistance coefficient”, *JETP letters*, **102**:10, (2015), 668–673.
- [4] Pavel V. Prudnikov, Vladimir V. Prudnikov, Maria A. Menshikova, Natalia I. Piskunova, “Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **387**, (2015), 77–82.
- [5] Koh Yang Wei, Lee Hwee Kuan, Okabe Yutaka, “Dynamically optimized Wang-Landau sampling with adaptive trial moves and modification factors”, *Physical Review E*, **88**:5, (2013), 053302.
- [6] Belokon V. I., Kapitan V. Yu., Dyachenko O. I., “Concentration of magnetic transitions in dilute magnetic materials”, *Journal of Physics: Conference Series*, **490**:1, (2014), 012165.
- [7] Landau David P., Binder Kurt, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge university press, 2014.
- [8] V. Yu. Kapitan, A. V. Perzhu, and K. V. Nefedev, “High-performance Monte Carlo Simulation of Multilayer Magnetic Films”, *Journal of Nano- & Electronic Physics*, **9**:5, (2017), 05015(4pp).
- [9] V. Yu. Kapitan, K. V. Nefedev, “Labyrinth Domain Structure in the Models with Long-range Interaction”, *Journal of nano- and electronic physics*, **6**:3, (2014), 03005 [4 pages].
- [10] S. Do Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, J. H. Han, “Skyrmions and anomalous hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet”, *Physical Review B*, **80**:5, (2009), 054416.

- [11] A. Belemuk, S. Stishov, “Phase transitions in chiral magnets from Monte Carlo simulations”, *Physical Review B*, **95**:22, (2017), 224433.
- [12] V. Yu. Kapitan, Y. A. Shevchenko, A. V. Perzhu, E. V. Vasiliev, “Thermodynamic Properties of Heisenberg Spin Systems”, *Key Engineering Materials*, **806**:4, (2019), 142–154.
- [13] I. Dzyaloshinsky, “A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **4**:4, (1958), 241–255.
- [14] T. Moriya, “Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism”, *Physical Review*, **120**:1, (1960), 91.
- [15] Rakić Predrag S., Radošević Slobodan M., Mali Petar M. Stričević Lazar M., Petrić Tara D, “Multipath Metropolis simulation: An application to the classical Heisenberg model”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **44**, (2016), 69–80.
- [16] F. Wang, D. Landau, “Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states”, *Physical review letters*, **88**:10, (2001), 2050.
- [17] M. Deserno, “How to generate equidistributed points on the surface of a sphere”, *If Polymerforschung (Ed.)*, 2004, 99.
- [18] G. Brown, T. C. Schulthess, “Wang–Landau estimation of magnetic properties for the Heisenberg model”, *Journal of applied physics*, **97**:10, (2005), 477.
- [19] James Ahrens, Berk Geveci, Charles Law, “Paraview: An end-user tool for large data visualization”, *The visualization handbook*, **77**, (2005).
- [20] A. A. Sorokin, S. V. Makogonov, S. P. Korolev, “The information infrastructure for collective scientific work in the Far East of Russia”, *Scientific and Technical Information Processing*, **44**:4, (2017), 302–304.

Поступила в редакцию
25 октября 2019 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования,
государственное задание No. 075-00400-19-01.

*Kapitan V. Yu., Vasiliev E. V., Shevchenko Y. A., Perzhu A. V.,
Kapitan D. Yu., Rybin A. E., Soldatov K. S., Makarov A. G.,
Volotovskiy R. A., Nefedev K. V.* Thermodynamic properties of Heisenberg
spin systems on a square lattice with the Dzyaloshinskii–Moriya interaction.
Far Eastern Mathematical Journal. 2020. V. 20. No 1. P. 63–73.

ABSTRACT

We present results of numerical simulation of thermodynamics for array of Classical Heisenberg spins placed on 2D square lattice. By using Metropolis and Wang–Landau methods we show the temperature behaviour of system with competing Heisenberg and Dzyaloshinskii–Moriya interaction (DMI) in contrast with classical Heisenberg system. We show the process of nucleating of skyrmion depending on the value of external magnetic field.

Key words: *numerical simulation, thermodynamics, Heisenberg model, Metropolis algorithm, Wang–Landau algorithm, Dzyaloshinskii–Moriya interaction, skyrmion.*