

Министерство образования и науки РФ
ФГАОУ ВО Дальневосточный федеральный университет «ДВФУ»
Школа естественных наук
Кафедра компьютерных систем

Исследование основных состояний спиновых стекол методами машинного обучения

Диплом на соискание степени бакалавра

Выполнил:

студент группы Б8117-09.03.02

Король Алена Олеговна

Научный руководитель:

к.ф.-м.н.

доцент Капитан Виталий Юрьевич

Владивосток 2021

Содержание

1	Модель и метод	2
1.1	Модель Гейзенберга	2
1.2	Алгоритм Метрополиса	3
1.3	Влияние внешнего магнитного поля на формирование различных фаз системы с ДМ-взаимодействием	4
2	Результаты и обсуждение	6
2.1	Спиновые состояния в отсутствии внешнего магнитного поля	6
2.2	Фазовые диаграммы	7

1 Модель и метод

В данном исследовании мы применяли алгоритм Метрополиса для Монте-Карло моделирования магнитных скирмионов в рамках классической модели Гейзенберга с учетом прямого короткодействующего обмена и взаимодействия Дзялошинского-Мория.

1.1 Модель Гейзенберга

Модель Гейзенберга – это одна из математических моделей статистической физики, заданная на 2D решетке для моделирования ферромагнетизма. Применяется для исследования фазовых переходов, когерентного вращения и критических точек. Мы использовали решеточный гамильтониан, состоящий из обменного гамильтониана Гейзенберга (H_J) и гамильтониана ДМ-взаимодействия (H_D) [Do Yi et al.(2009)Do Yi, Onoda, Nagaosa, and Han, Belemuk and Stishov(2017)Belemuk, and Stishov] (см. формулы (1,2,3)):

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

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

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

где \vec{S}_r - атомный спин, J - константа ферромагнитного короткодействующего обмена, D - константа ДМ-взаимодействия, H_Z - внешнее магнитное поле, H_A - константа анизотропии.

Спин $\vec{S} = S^x; S^y; S^z$ является трехкомпонентным вектором единичной длины и имеет три степени свободы:

$$S^x = \sin(\varphi) \cos(\vartheta), \quad (4)$$

$$S^y = \sin(\varphi) \sin(\vartheta), \quad (5)$$

$$S^z = \cos(\varphi), \quad (6)$$

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

Взаимодействие Дзялошинского – Мориа изначально было моделью, описывающей слабое ферромагнитное взаимодействие [Ezawa.(2011)]. Дзялошинский представил модель и ввел ассиметричный термин, основываясь на теории симметрий. Позже Мориа обнаружил, что взаимодействие основывается на спин-орбитальной связи [Moriya(1960)]. Таким образом, ДМ-взаимодействие является характеристикой взаимодействующих спинов, которая имеет сильную спин-орбитальную связь и появляется в системе без инверсионной симметрии.

Таблица 1: Измерительные характеристики

Исследованные величины	
Темновое смещение (BLO)	256
Максимальный линейный сигнал	3070 DN
Значение насыщения	3470 DN

Наша система спинов Гейзенберга (магнитная пленка) имеет размер $N = L \times L$. Каждый спин расположен в узлах решетки и имеет четыре ближайших соседа: сверху, снизу, слева, справа с учетом периодических граничных условий.

Определение понятий даны в разделе 1.2, там же можно посмотреть остальные теоремы.

1.2 Алгоритм Метрополиса

Монте-Карло моделирование с помощью алгоритма Метрополиса используется во многих областях науки, поскольку имеет ряд преимуществ:

1. Алгоритм позволяет корректно учитывать температуру;
2. Позволяет исследовать наночастицы и их ансамбли вплоть до атомов, что дает возможность подробного изучения их структуры.

Из недостатков – в точке, где температура близка к температуре фазового перехода, алгоритм замедляется и число шагов, необходимое для приведения системы в состояние термодинамического равновесия, возрастает по экспоненциальному закону.

Алгоритм Метрополиса используется для нахождения глобального минимума. Основная идея заключается в равномерном семплировании пространства состояний с заданной вероятностью распределения. На каждой итерации выборки конфигурация системы меняется за счет изменения ориентации случайно выбранного спина. Конфигурация принимается и становится исходной для следующего шага, если новое значение энергии больше предыдущего ($E_1 > E_2$), в противном случае она принимается с вероятностью:

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min\left(\frac{P(E_i)}{P(E_j)}, 1\right). \quad (7)$$

За счет этого алгоритм позволяет не застревать в локальных минимумах. Сходимость достигается по прохождении заданного числа Монте-Карло шагов до момента, когда среднеквадратичное отклонение достигает минимума, заданного в зависимости от решаемой задачи.

Согласно каноническому распределению Гиббса, вероятность энергии каждой конфигурации системы при моделировании температурного поведения равна:

$$P(E_i) = \min \left(\frac{e^{-E_i/k_B T}}{Z} \right). \quad (8)$$

Из уравнений 7, 8, следует:

$$\begin{aligned} J_\lambda(x_2, y_2, s_2) &= \iint K_\lambda(x_2, y_2) \cdot \left| m_\lambda \left(\frac{x_2 - x_0}{\lambda \cdot s_2}, \frac{y_2 - y_0}{\lambda \cdot s_2} \right) \right|^2 dx_0 dy_0 = \\ &= K_\lambda(x_2, y_2) \otimes \left| m_\lambda \left(\frac{x_2}{\lambda \cdot s_2}, \frac{y_2}{\lambda \cdot s_2} \right) \right|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

где ΔE - изменение энергии системы в результате смены конфигурации, T - абсолютная температура.

В процессе семплирования для каждой принятой конфигурации системы вычисляются искомые характеристики, например, намагниченность, теплоемкость (см. формулы (10,11))

$$M = \frac{\sum_{i=1}^N S_i}{N}. \quad (10)$$

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}. \quad (11)$$

- В этой фазе спины расположены в случайном порядке
- Начало применения магнитного поля перпендикулярно плоскости xy
- После выравнивания полос против магнитного поля, они преобразуются в скирмионы
- Когда магнитное поле достаточно велико, система переходит в ферромагнитное состояние

1.3 Влияние внешнего магнитного поля на формирование различных фаз системы с ДМ-взаимодействием

Рассмотрим процесс зарождения скирмионных структур. В магнитной пленке, при увеличении напряженности магнитного поля, выделяют различные фазы, в которые переходит система спинов Гейзенберга. Мы выделили семь фаз:

1. Парамагнитная

В этой фазе спины расположены в случайном порядке, что равно парамагнитному состоянию вещества при $T \rightarrow \infty$.

2. Спиральная

В отсутствие магнитного поля, как было описано выше, ДМ-взаимодействие и прямой обмен формируют полосу [Ezawa.(2011)]. Спины остаются перпендикулярными друг другу, но при этом разворачиваются, преобразовывая систему в полосовой домен, тем самым формируя спирали.

3. Лабиринтная

Начало применения магнитного поля перпендикулярно плоскости x_y , заставляет спины пытаться сохранить взаимодействие со спинами, которые обращены вверх. Оставаясь почти параллельными друг другу, они поворачиваются в направлении почти перпендикулярном полю. Таким образом, они образуют хаотично направленные лабиринтные доменные структуры.

4. Спираль-скирмионная

При увеличении магнитного поля некоторые спины в спиральных начинают вращаться против магнитного поля, что ведет к локальному образованию скирмионов.

5. Скирмионная

После выравнивания полос против магнитного поля, они преобразуются в скирмионы в определенном диапазоне этого поля. В этих скирмионах спины сонаправлены с магнитным полем от центра скирмиона. В итоге образуется устойчивая скирмионная решетка, спины которой сонаправлены с магнитным полем от центра скирмиона.

6. Скирмион-ферромагнитная

Последующее увеличение магнитного поля ведет к уменьшению числа скирмионов, поскольку их центральные спины становятся сонаправлены полю. Система начинает входить в ферромагнитное состояние со слабо взаимодействующими скирмионами.

7. Ферромагнитная

Когда магнитное поле достаточно велико, система переходит в ферромагнитное состояние. Скирмионы полностью исчезают, образуя однородный домен, в котором все спины сонаправлены с магнитным полем.

Различные спиновые текстуры получаются путем варьирования параметров D - величины взаимодействия Дзялошинского-Мория и B - внешнего магнитного поля при достаточно низких температурах. При $T \rightarrow \infty$ влияние D и B здесь незначительно.

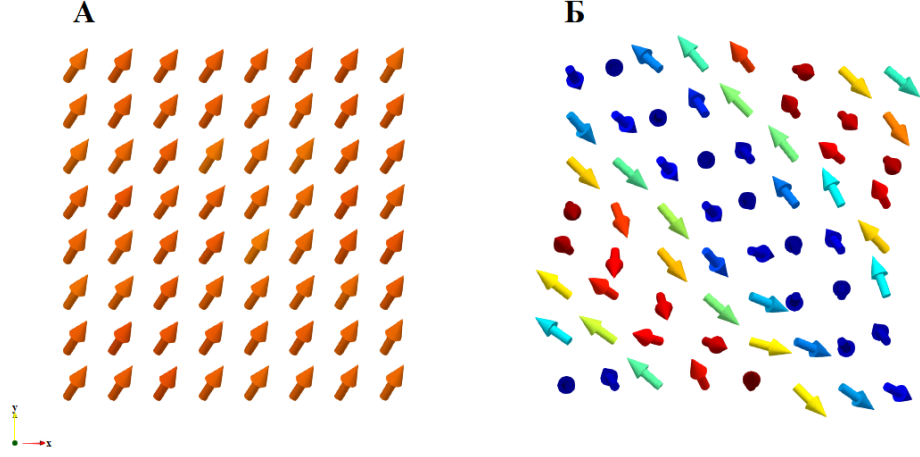


Рис. 1: Основные состояния спиновой модели Гейзенберга на квадратной решетке ($J=1$), возникающие при $T \rightarrow 0$. (А) без ДМ-взаимодействия, (Б) с ДМ-взаимодействием ($D=1$), энергия $ED=0 \approx -1.95$ и $ED=1 \approx -2.05NJ$ соответственно. Размер системы $N=64$

2 Результаты и обсуждение

2.1 Спиновые состояния в отсутствии внешнего магнитного поля

Рассмотрим модель Гейзенберга только с прямым короткодействующим обменом, а также с учетом его конкуренции с ДМ взаимодействием, при отсутствии внешнего магнитного поля.

Таблица 2: Измерительные характеристики

Исследованные величины	
Темновое смещение (BLO)	256
Максимальный линейный сигнал	3070 DN
Значение насыщения	3470 DN

Без ДМ-взаимодействия (см. рисунок 1А) в системе наблюдается ферромагнитное упорядочение – все спины упорядочены в одну сторону.

В системе с ДМ-взаимодействием (см. рисунок 1Б) появляется конкуренция между ДМ и обменным взаимодействием, и они образуют полосовую структуру. Вследствие этого в основном состоянии системы мы имеем конфигурацию, в которой спины сонаправлены по линии и в соседних линиях развернуты на угол $\approx \frac{\pi}{2}$, при этом каждая восьмая линия имеет одинаковое направление. Такое состояние системы носит название спиральной фазы, поскольку система формируется в полосовой домен, образуя при

этом спирали. Основные классификации спиновой системы сопоставимы с типами Блоха и Нееля для доменных стенок [Neel(1954), Bloch(1946)].

2.2 Фазовые диаграммы

Путем изменения параметров температуры, ДМ-взаимодействия и магнитного поля мы получили различные состояния спиновой системы. Таким образом, при постоянном $D=1,5$, мы можем исследовать то, как сказывается зависимость поля от температуры на системе.

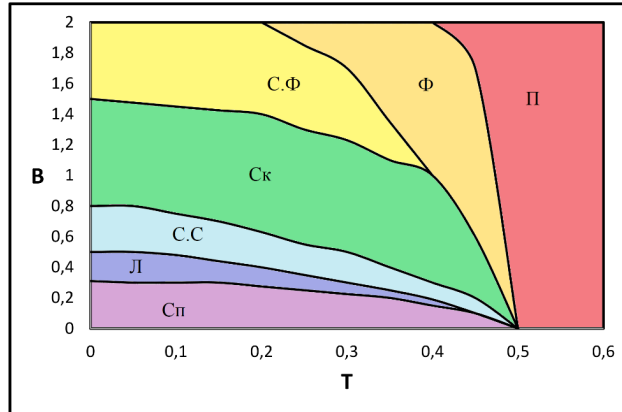


Рис. 2: Фазовая диаграмма в плоскости (T, B) при $D=1,5$

Из диаграммы на рисунке 2, очевидно, что в зоне низких температур мы имеем упорядоченные фазы. Далее, зафиксировав температуру $T=0,4$, мы можем исследовать изменение конфигураций системы при постоянной температуре T в зависимости от величины взаимодействия Дзялошинского-Мория и B - внешнего магнитного поля

По диаграмме на рисунке 3 нетрудно заметить, что для стабильной скирмионной фазы необходимо значение поля из узкого диапазона. Также очевидно, что скирмионная фаза отсутствует при $D < 0,2$. Но дальнейшая зависимость прослеживается весьма четко: значение B прямо пропорционально D .

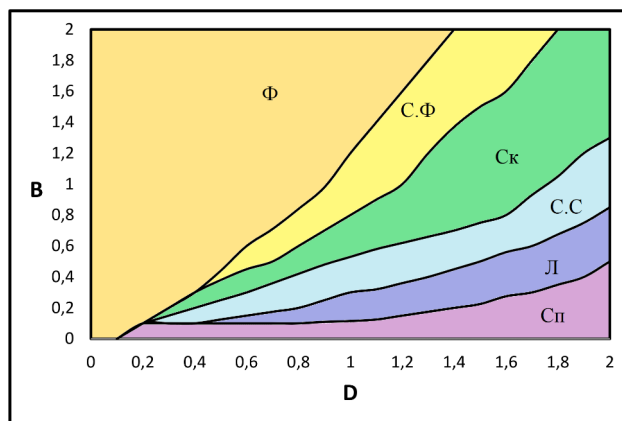


Рис. 3: Фазовая диаграмма в плоскости (D, B) при $T=0,4$

Список литературы

- [Do Yi et al.(2009)Do Yi, Onoda, Nagaosa, and Han] Do Yi, S.; Onoda, S.; Nagaosa, N.; Han, J. H. Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet. *Physical Review B* **2009**, *80*, 054416.
- [Belemuk and Stishov(2017)Belemuk, and Stishov] Belemuk, A.; Stishov, S. Phase transitions in chiral magnets from Monte Carlo simulations. *Physical Review B* **2017**, *95*, 224433.
- [Ezawa.(2011)] Ezawa., M. Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films. *Physical Review B*. **2011**, *83*, 100–408.
- [Moriya(1960)] Moriya, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review* **1960**, *120*, 91.
- [Neel(1954)] Neel, L. Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d'orientation. *Journal de Physique et le Radium* **1954**, *15*, 225–239.
- [Bloch(1946)] Bloch, F. Nuclear induction. *Physical review* **1946**, *70*, 440.