

Варіант 1 – Моделювання статичних властивостей у гібридних структурах феромагнетик-парамагнетик

Загальна актуальність напрямку. Нещодавнє зростання інтересу до дослідження систем феромагнетик-парамагнетик пов'язано з перспективами поєднання магнітних систем та систем квантових обчислень. Основна ідея такого напрямку, який отримав назву “квантової магنونіки”, є забезпечення зв'язку між кубітами за допомогою біжучих магنونів, які, так само як і кубіти, характеризуються спіновим квантовим числом, що робить таке поєднання природним. У порівнянні з існуючою технологією зв'язку за рахунок оптичних фотонів магнони можуть забезпечити значно менші розміри систем, більшу ефективність зв'язку, а також дозволити використовувати різноманітні нелінійні ефекти. Для створення таких систем ключовою вимогою є застосування магнітних матеріалів з якомога нижчим власним затуханням магнітних збуджень при низьких температурах. Найкращим відомим на сьогодні матеріалом є залізо-ітрієвий гранат (ЗІГ). При цьому тонкі плівки ЗІГ вирощуються на підкладках галій-гадолінієвого гранату, який є парамагнетиком. Вивчення таких гібридних структур за низьких температур (в діапазоні 10 мК – 1 К, коли за яких магнітна система парамагнетика може потенційно істотно впливати на властивості магنونів у ЗІГ) становить значний інтерес з точки зору пошуку оптимальної платформи для розвитку квантової магنونіки.

Мета роботи: розробка числового алгоритму для розрахунку статичних властивостей гібридних структур феромагнетик-парамагнетик при низьких температурах з урахуванням ефектів розмагнічування.

Актуальність безпосередньої задачі з точки зору фізики. Неоднорідні статичні поля, що створюються парамагнетиком у таких системах, змінюють властивості магنونів у феромагнетикі, у першу чергу можуть істотно впливати час життя магنونів та когерентність.

Альтернативні підходи. Дієвих альтернативних підходів на сьогодні не існує. Існують роботи по дослідженню статичних властивостей скінчених зразків парамагнетика, але тільки в одновимірному випадку. Також є спроби моделювати парамагнетик як феромагнетик без обмінної взаємодії і використовувати стандартні програми для моделювання феромагнітних зразків (так звані програми мікромагнітного моделювання), однак коректність такого підходу жодного разу не було перевірено.

Потенційна новизна та цікавість з точки зору чисельних методів. 1) Властивості феро- та парамагнетика описуються істотно різними рівняннями, що пов'язано зі збереженням модуля вектора намагніченості у першому випадку і відсутністю такого у другому. Статичний стан парамагнетика зазвичай визначається шляхом розв'язання системи нелінійних рівнянь Бріллюена, в той час як стан феромагнетика типово визначається шляхом мінімізації його загальної енергії. Відповідно, потрібно поєднати ці два підходи в один. 2) Всі магнітні матеріали виявляють далекодіючу магнітодипольну взаємодію, що призводить до інтегральних рівнянь або, в дискретному представленні, до зв'язку окремих комірок з великою кількістю сусідів. 3) Зазвичай товщини феро- та парамагнітних шарів у таких гібридних структурах відрізняються на 1-2 порядки, тому для адекватного використання ресурсів доцільним може бути використання неоднорідної сітки; це водночас ускладнює розрахунки коефіцієнтів розмагнічування (ядра інтегрального інтегрального)

Безпосередні задачі:

– розробка числового алгоритму та написання коду для моделювання гібридних структур феро-/парамагнетик;

- порівняння точного числового розв'язку з існуючими в літературі наближеннями, визначення меж їх коректного застосування;
- (опційно) моделювання статичних властивостей в програмах мікромагнітного моделювання з урахуванням теплових шумів та порівняння з точним розв'язком. Ця задача може бути цікава для подальшого розвитку напрямку, а саме дослідження динамічних властивостей таких систем.

Можливість продовження/розвинення роботи: моделювання резонансних властивостей таких систем та поширення хвиль у них. Основна складність – наявність випадкового внутрішнього поля у парамагнетика, що потребуватиме або прямого моделювання стохастичних рівнянь, або розвинення інших підходів.

Технічні деталі

Стан парамагнетика описується вектором намагніченості \mathbf{M} , який задовольняє неявному рівнянню:

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{B}_t}{|\mathbf{B}_t|} M_s \mathcal{B}_J \left[\frac{J g \mu_B}{k_B T} (|\mathbf{B}_t| + \lambda |\mathbf{M}|) \right],$$

де \mathcal{B}_J – функція Бріллюена для спіна J , і $\mathbf{B}_t = \mathbf{B}_e - \mathbf{B}_{\text{dip}}$ є повним магнітним полем, що складається з зовнішнього \mathbf{B}_e та поля розмагнічування \mathbf{B}_{dip} .

Статичний стан феромагнетика визначається з мінімуму енергії

$$E = -\mathbf{B}_e \cdot \mathbf{M} - \frac{1}{2} \mathbf{B}_{\text{dip}} \cdot \mathbf{M} - \frac{1}{2} \mathbf{B}_{\text{ex}} \cdot \mathbf{M}$$

Тут додатково з'являється обмінне поле $\mathbf{B}_{\text{ex}} = A \nabla^2 \mathbf{M}$.

Істотною складністю є те, що поле розмагнічування – нелокальний функціонал намагніченості. Його можна знаходити, розв'язуючи додатково рівняння Максвела в магнітостатичному наближенні, або виразити інтегральною функцією

$$\mathbf{B}_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \int_V \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

з ядром

$$\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \nabla_r \left(\nabla_{r'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right).$$

Варіант 2 – Моделювання Розповсюдження магнітопружних хвиль у гібридних структурах п'єзоелектрик феромагнетик

Загальна актуальність. Поверхневі акустичні хвилі (ПАХ) у п'єзоелектриках активно застосовуються в електроніці надвисоких частот (НВЧ). Це дуже добре розвинена галузь з ринком в декілька мільярдів доларів на рік. У той же час деякі функціональні пристрої неможливо реалізувати на акустичних хвилях. Це, зокрема, стосується невзаємних пристроїв, таких як ізолятор та циркулятор, та нелінійних пристроїв. Останнім часом ведуться активні спроби реалізувати такі пристрої в гібридних системах за рахунок зв'язку між акустичними хвилями у п'єзоелектрику та спіновими хвилями у феромагнітному шарі чи більш складній феромагнітній структурі.

Мета роботи: розробка алгоритму та написання програми для моделювання розповсюдження гармонічних поверхневих хвиль у гібридних структурах, зокрема, визначення їх поглинання та відбиття від границь феромагнітного шару.

Актуальність безпосередньої задачі. На сьогодні існують тільки наближені методи, які дозволяють розрахувати затухання гібридних хвиль та невзаємність фазового набігу. Наявність результатів точного числового моделювання дозволить зрозуміти межі застосовності існуючих наближень, а також зрозуміти порядок величин відбиття хвилі від гібридної структури, що є важливим технічним параметром пристроїв НВЧ.

Опис задачі. З точки зору числового розв'язання задача зводиться до розв'язання рівняння еластодинаміки (лінійне векторне рівняння другого порядку за часом і координатою) у пружному середовищі та зв'язаних рівнянь еластодинаміки та рівняння Ландау-Ліфшиця (нелінійне рівняння першого порядку по часу і інтегрально-диференціальне по координаті) у магнітному середовищі. Задачу можна ускладнити враховувавши п'єзоелектричні ефекти, які присутні майже у всіх підкладках, що використовуються у ПАХ-електроніці. Потенційні складнощі з точки зору числового розв'язання може становити еванесцентний характер ПАХ, що потребує або моделювання досить товстих шарів (і відповідно великих ресурсів), або розвинення підходу як моделювати ефективно напівнескінченний шар, або використання неоднорідної сітки. На даному етапі задача є фактично двовимірною у координатах товщина – напрямок поширення хвилі.

Подальше розширення. У подальшому можливе розвинення задачі на повноцінну тривимірну систему і моделювання поширення ПАХ у ПАХ-резонаторах (наприклад, кільцевих), навантажених магнітним шаром, або спрямованих відгалужувачах ПАХ, також під впливом магнітних шарів. Ці задачі є цікавими з точки зору розробок ПАХ-циркуляторів, яких на сьогодні не існує. Також тривимірна модель дозволить вивчати нелінійні ефекти, такі як обмеження потужності та інші.