

# 自旋轨道矩诱导的反铁磁磁矩翻转

*Tongji University*

- 系统自由能

$$E = E_{\text{exc}} + E_d + E_k + E_{\text{Zeeman}} + E_{\text{DMI}}$$

$$E_{\text{exc}} = J \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j$$

$$E_d = -\mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_d$$

$$E_K = K \sum_{i,j,k} \left[ 1 - (\vec{m}_{i,j,k} \cdot \vec{k})^2 \right] \delta V$$

$$E_{\text{Zeeman}} = -\mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_{\text{Zeeman}}$$

$$E_{\text{DM}} = D \sum \vec{r}_{i,j} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_j)$$

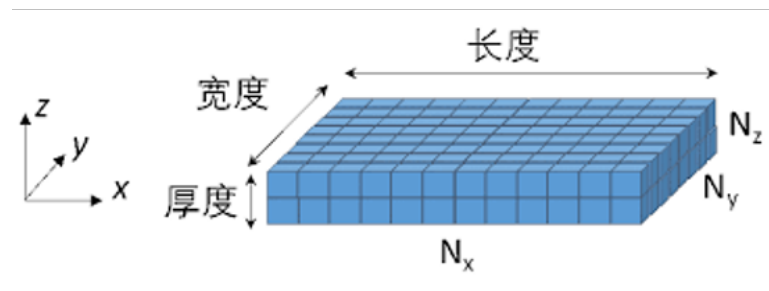


Figure 1 有限差分法示意图

- DMI 理论

我们将 DMI 能量离散化

$$E_{\text{DM}} = D_{i,j} \cdot \sum_{i,j} (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j)$$

通过场和能量的关系  $\mathbf{H} = -\nabla_{\mathbf{m}} E$  可以得到离散化的 DMI 有效场的表达式

$$\vec{H}_{\text{DM}} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{D}{\mu_0 M_s} \sum (\vec{m}_j \times \vec{r}_{i,j})$$

```
extern void calcai_3DMIfrac(int *nmx, int *nmy, int *nmz,
                           unsigned char type[],
                           double D_nu[256],
                           double D_mix_nu[256],
                           double Dx[], double Dy[],
                           double Dz[], double D_dir[3],
                           double Dc_dir[3]);
//计算面内以及层间 DMI 系数设置 DMI 方向

extern double ex_dmi(int *nmx, int *nmy, int *nmz, double *dx,
                    double *dy, double *dz, double Dx[],
                    double Dy[], double Dz[],
                    double mn[], double m[][3]);
//计算体系 DMI 能量

void calc_Hd2(double m[][3], double mn[], double Hx[][3],
              double heff[][3],
              int ipmax, int *nx0, int *ny0, int *nz0, int
idx,

              int idy,
              int idz, int iaxdx, int iaxdy, int iaxdz, int
iaydx,

              int iaydy,
              int iaydz, int iazdx, int iazdy, int iazdz,
              double *dx,
              double *dy, double *dz, double *Dx, double *Dy,
              double *Dz); //计算 DMI 有效场
```

在通过静磁能求解退磁能时，其离散形式为

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i,j,k=1,2,\dots} H_{d,i,j,k} \cdot M_{i,j,k} \delta V$$

我们通过求解 Poisson 方程的方法来获得磁标势  $V$ ， $(\nabla^2 V_d)_{i,j,k} = -\rho_{i,j,k}$ 。采用松弛迭代法(SOR)求解 Poisson 方程，SOR 方法主要是通过求解

$$\underbrace{Ax = b}_{\text{linear equation}} \Rightarrow (D + \omega L)x = \omega b - [\omega U + (\omega - 1)D]x$$

其中  $D$  为  $A$  的对角矩阵， $L$  为上角矩阵， $U$  为下角矩阵， $\omega$  为弛豫因子。

矩阵非常适合用 CUDA 计算，可以降低时间和空间复杂度，提高计算速度。

```
__global__ void updateVKernel_even(double *d_V, double
*d_chrg, int *d_maxiter,int ndx, int ndy, int ndz, int
idx, int idy, int idz, int icdx, int icdy, int icdz,
double dx2, double dy2, double dz2, double diag,
double w,double dVn,double dV,double resid,double
maxf,double minf,double medf,double medf2){
    int ix = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
    int iy = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;
    int iz = blockIdx.z * blockDim.z + threadIdx.z;
    if (ix >= 1 && ix < ndx && iy >= 1 && iy < ndy &&
    iz >= 1 && iz < ndz && (ix + iy + iz) % 2 == 1){
        ...
    }
}
```

可以将原本三层嵌套的 for 循环，通过对线程的索引降低为一次并行计算。

- 我们利用层间 DMI 作用实现磁矩无场翻转作为程序验证的案例。

- 程序参数

$$M_s = 1.5 \times 10^6 \text{ A/m}$$

$$D_{\text{inter}} = 2.0 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$$

$$J_{\text{inter}} = 2.8 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$$

$$K = 1.5 \times 10^6 \text{ J/m}^3$$

$$\text{cell size} = 1 \times 1 \times 4 \text{ nm}$$

$$\text{cell num} = 2 \times 50 \times 50$$

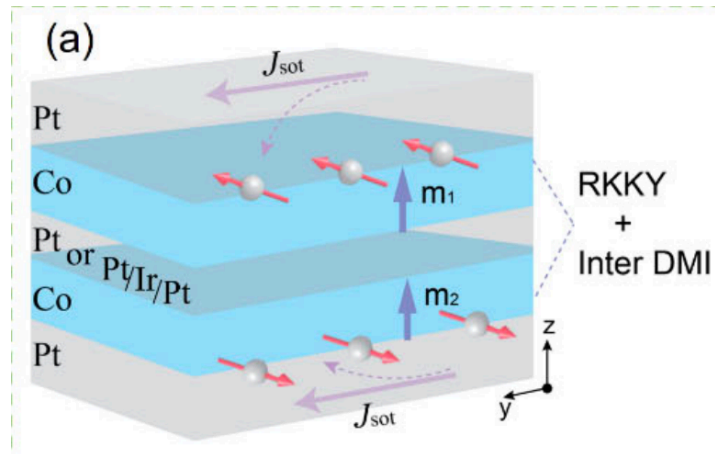


Figure 2 层间 DMI 实现无场翻转结构

Figure 2 展示了 Pt/Co/Pt/Co/Pt 结构的示意图，两个 Co 层之间有 RKKY 和层间 DMI 效应。顶部和底部 Pt 层充当导体，用于施加电流 pulse 并生成 SOT。

- 物理过程

施加电流 pulse 产生 SOT

磁矩发生翻转

撤去电流使磁矩弛豫

在 DMI 作用下磁矩发生翻转  
翻转方向取决于 DM 常数方向

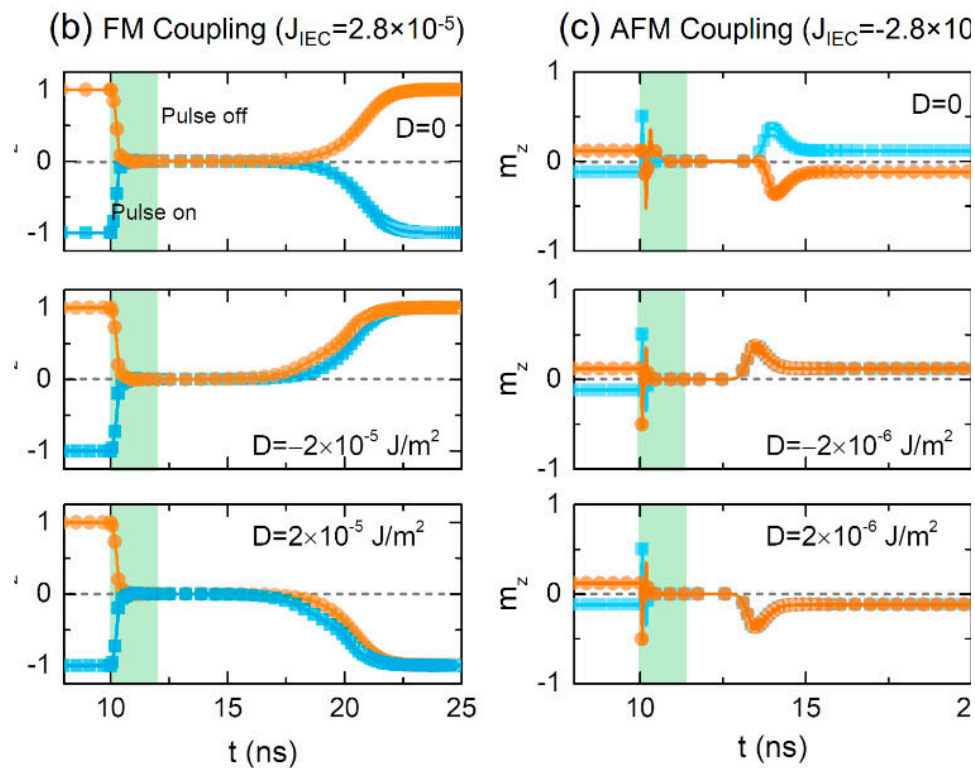


Figure 3 层间 DMI 实现无场翻转物理过程

- Figure 3 (b)展示了在前 10ns 未加电流时，FM 结构中磁矩的初始状态。Figure 3 (c)展示了在 10ns 前 AFM 结构中磁矩的初始状态。
- 随着 10ns 后施加电流 pulse，在 SOT 效应的作用下，磁矩发生翻转，倒向了面内方向。
- 电流 pulse 结束后，在 DMI 作用下，系统弛豫足够长时间后，磁矩在层间 DMI 的作用下发生了可控翻转，翻转方向取决于 DMI 方向。

欢迎各位老师批评指正！