

Manganitų plonųjų sluoksnių elektrinių bei magnetinių savybių tyrimas Monte Karlo metodu

Investigation of the electrical and magnetic properties of thin manganite films using Monte Carlo method

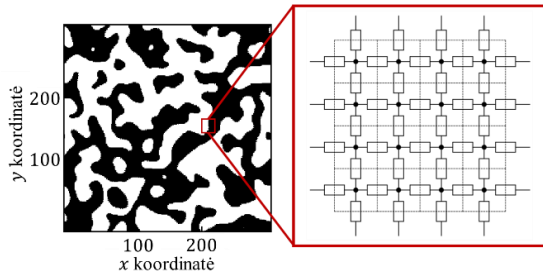
Jorūnas Dobilas^{1,2}, Voitech Stankevič², Nerija Žurauskienė², Evaldas Tornau², Skirmantas Keršulis²

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, funkcinių medžiagų ir elektronikos skyrius, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius
jorunas.dobilas@ff.stud.vu.lt

Po kolosalios magnetovaržos (angl. „colossal magnetoresistance CMR) atsiradimo manganitai tapo plačiai nagrinėjama medžiaga. Plonieji sluoksniai, pagaminti iš šių medžiagų, pasižymi didele magnetovarža (iki 99 %) stipriuose magnetiniuose laukuose (iki 100 T) ir plačiame temperatūrų ruože [1]. Keičiant šių sluoksnių auginimo sąlygas galima pasiekti didelį magnetinio lauko jautrį kambario temperatūroje, todėl manganitai taikomi magnetinio lauko jutiklių pramonėje [2]. Fizikinių procesų aprašymui buvo pateikta keletas modelių, tačiau kokybinis auginimo parametrų sąryšis su šiomis savybėmis vis dar tyrinėjamas [3][4].

Norint sumodeliuoti minėtųjų plonųjų manganitų sluoksnių elektrines ir magnetines savybes, buvo sukurtas Monte Karlo metodu pagrįstas modelis. Šis modelis susideda iš Ising'o ir varžų tinklo modelių (žr. 1 pav.). Ankstesnysis aprašo magnetines, o pastarasis – elektrines savybes.



1 pav. Ising'o gardelės konvertavimas į varžų tinklą

Ising'o modelio standartinis hamiltonianas vienam gardelės mazgui užrašomas tokiu būdu:

$$H_i = \mu_B g B_z S_{iz} - J S_{iz} \sum_{\langle i,j \rangle} S_{jz}, \quad (1)$$

čia μ_B – Bohr'o magnetonas, g – giromagnetinis santykis, B_z – magnetinio srauto tankio z projekcija, S_{iz} – i -tojo sukinių z projekcija ir J – pakaitinės sąveikos konstanta. Antrajame naryje sumuojama tik artimiausius kaimynus sukiniui i .

Norint pritaikyti Ising'o modelį polikristaliniams manganitų sluoksniams, jis buvo modifikuotas įvedant pakaitinės sąveikos konstantos funkcinę priklausomybę nuo koordinatės, t.y. $J = J(\mathbf{r})$. Tuomet kristaliniuose $J = J_G$ ir tarpkristalitinėje terpėje $J = J_{GB}(\mathbf{r}) \leq J_G$.

Ising'o gardelės varža taip pat skaičiuojama naudojant Monte Karlo metodiką. Iš vieno gardelės šono yra paleidžiama N elektronų. Elektronų tikimybė pereiti

iš vieno gardelės mazgo į kitą yra proporcinga to kelio laidumui. Kiekvieno kelio laidumas apibrėžiamas iš dviejų komponentų:

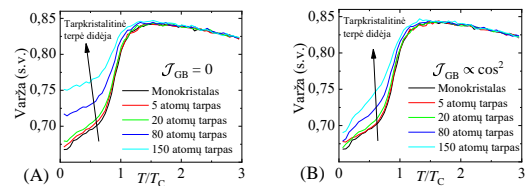
$$G_i = G(T) + G_1 S_i \cdot s, \quad (2)$$

čia $G(T) \propto \exp\left(\frac{a}{T}\right)$ yra savitasis laidumas, apibrėžiamas pagal Mott'o modelį, G_1 – sukinių sklaidos laidumas (dvigubos pakaitos mechanizmas), S ir s – atitinkamai mazgo ir elektrono sukinių projekcijos.

Sumodeliavus 300×300 matmenų Ising'o gardelę su keičiamu tarpkristalitinės terpės plokiumi, apskaičiuotos varžos ir magnetovaržos priklausomybės nuo temperatūros ir magnetinio lauko stiprio. Gauti rezultatai parodė panašias charakteristikas lyginant su realiomis medžiagomis.

Temperatūrinė varžos priklausomybė pasižymi eksponentiniu kitimu aukštesnėse negu Curie (T_C) temperatūrose. Tuo tarpu, dėl magnetinio fazinio virsmo, žemesnėse temperatūrose varža sumažėja. Šis sumažėjimas auga plonėjant tarpkristalitinei terpei (žr. 2 pav.). Nagrinėjant magnetovaržą nuo magnetinio lauko stebima histerzė, kurios maksimumo taškai yra ties įmagnetėjimo koercinio lauko vertėmis. Taip pat, didėjant tarpkristalitinei terpei šie maksimumai mažėja, kas stebima ir realiuose bandiniuose.

Tinkamai parinkus modelio parametrus galima įvertinti auginimo sąlygų įtaką plonųjų manganitų sluoksnių elektrinėms ir magnetinėms savybėms.



2 pav. Varžos priklausomybės nuo temperatūros, sunormuotos į T_C , esant skirtingiems tarpkristalitinės terpės plokiumams. Parinktos pakaitinės sąveikos terpėje funkcijos $J_{GB} = 0$ (A) ir $J_{GB} \propto \cos^2$ (B).

Reikšminiai žodžiai: Manganitai, magnetovarža, Monte Karlo metodai

Literatūra

- [1] N. Žurauskienė et al. IEEE Transactions on Magnetism **50**(11) p. 1-4 (2014)
- [2] N. Žurauskienė Sensors **23** p. 2939 (2023)
- [3] S. Panwar et al. Solid-State Communications **223** p. 32-36 (2015)
- [4] J. E. Evetts et al. Philosophical Transactions of the Royal Society of London **356**(1742) p. 1593-1615 (1998)