

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Исследование влияния магнитного поля на фазовый переход в антиферромагнитных пленках методом компьютерного моделированияС. В. Белим,^a И. Б. Ларионов*Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет.
Россия, 644080, Омск, пр. Мира, д. 5.*

Поступила в редакцию 12.08.2019, после доработки 02.09.2019, принята к публикации 04.09.2019.

В статье проведено исследование влияния внешнего магнитного поля на температуру фазовых переходов в антиферромагнитных тонких пленках. Использован метод компьютерного моделирования для антиферромагнитной модели Изинга, имеющей геометрию тонкой пленки. Исследованы пленки с толщиной от 4 до 16 слоев. Показано, что температура антиферромагнитного фазового перехода убывает с ростом напряженности внешнего магнитного поля по квадратичному закону. Скорость убывания температуры зависит от толщины пленки и отношения обменных интегралов на поверхности и в основном объеме системы. Для каждой системы существует предельное значение напряженности магнитного поля, выше которого антиферромагнитный фазовый переход не происходит. Зависимость предельного значения напряженности магнитного поля от отношения обменных интегралов также носит квадратичный характер.

Ключевые слова: модель Изинга, тонкие пленки, температура Нееля, антиферромагнетики.
УДК: 537.621.3. PACS: 68.35.Rh.

ВВЕДЕНИЕ

Явления, наблюдающиеся при фазовых переходах в тонких антиферромагнитных пленках, по своему характеру отличаются от явлений как в бесконечных, так и в полубесконечных системах. Тонкие пленки, в отличие от бесконечных систем, имеют две свободные поверхности, что приводит к необходимости учета поверхностного антиферромагнетизма. Аналогичная ситуация присутствует и в полубесконечных системах. Однако в полубесконечных системах фазовый переход в основном объеме системы происходит так же, как и в бесконечной системе в силу того, что свободная поверхность дает бесконечно малый вклад в общесистемные термодинамические параметры. Поверхностный антиферромагнетизм может проявляться только в отличии температуры упорядочивания спинов на поверхности от температуры Нееля. Как следствие, на фазовой диаграмме появляется дополнительная фаза и соответствующие ей два фазовых перехода. Совсем другая ситуация наблюдается в тонких пленках. Общее количество слоев невелико, и два поверхностных слоя оказывают существенное влияние на термодинамические функции всей системы.

Можно выделить два основных отличия спинов, расположенных на поверхности, от спинов в основном объеме системы. Во-первых, поверхностные спины имеют меньшее количество ближайших соседей. Во всех спиновых моделях учитываются только ближайшие соседи, так как обменные интегралы убывают очень быстро с расстоянием. Как следствие, необходима меньшая энергия теплового движения для переворота спина. Во-вторых, энергия обменного взаимодействия на поверхности может отличаться от энергии обменного взаимодействия в основном объеме системы. Так, например, в работе [1] на ос-

нове расчетов из первых принципов для Gd получено значение межатомного расстояния в объеме кристалла 3.52 Å, тогда как на поверхности — 3.64 Å. Как следствие, отличаются и значения обменных интегралов на поверхности $J_S = 1.25$ и в объеме кристалла $J_B = 1.51$.

Компьютерное моделирование как ферромагнитных [2], так и антиферромагнитных [3] пленок показало, что для тонких пленок поверхностный фазовый переход не наблюдается. Система переходит из парамагнитной фазы в антиферромагнитную как единое целое. При этом увеличение поверхностного обменного интеграла приводит к росту температуры Нееля. Чем меньше толщина пленки, тем быстрее растет температура фазового перехода. Этот эффект обусловлен более высокой температурой упорядочивания поверхностных спинов. Упорядоченные структуры на поверхности оказывают существенное влияние на близлежащие слои [4, 5]. Но в силу малой толщины пленки все слои оказываются близкими к поверхности.

Существенное влияние на фазовые переходы в антиферромагнитных системах оказывает внешнее магнитное поле [6, 7]. Для бесконечных антиферромагнитных систем увеличение магнитного поля ведет к снижению температуры фазового перехода. Зависимость температуры Нееля от напряженности магнитного поля имеет квадратичный характер [8–10]. В связи с этим представляет интерес исследование совместного влияния величины поверхностного обменного интеграла и магнитного поля на температуру фазового перехода в антиферромагнитных пленках.

Цель данной статьи — исследование фазовых переходов в антиферромагнитной модели Изинга, имеющей геометрию тонкой пленки, во внешнем магнитном поле методом компьютерного моделирования.

^a E-mail: sbelim@mail.ru

1. ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ

Гамильтониан системы для тонких антиферромагнитных пленок в магнитном поле, описываемых моделью Изинга, имеет следующий вид:

$$H = -J_B \sum_B S_i S_j - J_S \sum_S S_i S_j - J_S \sum_{SB} S_i S_j + \mu h_v \sum S_i.$$

Здесь через S_i обозначен спин в i -м узле (+1/2 или -1/2); J_B — обменный интеграл в слоях пленки, не являющихся граничными; J_S — обменный интеграл на свободных поверхностях пленки и взаимодействия поверхностных спинов со спинами в первом подповерхностном слое; h_v — напряженность внешнего магнитного поля; μ — магнетон Бора. В первых трех слагаемых свободной энергии при суммировании учитываются только пары ближайших соседей. В первом слагаемом рассматриваются пары спинов, ни один из которых не расположен на свободной поверхности тонкой пленки. Во втором слагаемом учитываются пары спинов, расположенные на одной из свободных поверхностей. В третьем слагаемом суммируются пары спинов, один из которых располагается на свободной поверхности, а второй — в первом подповерхностном слое. При компьютерном моделировании удобней работать с безразмерными относительными величинами:

$$R = J_S/J_B, \quad h = \mu h_v/J_B.$$

В этом случае гамильтониан примет вид

$$H/J_B = - \sum_B S_i S_j - R \sum_S S_i S_j - R \sum_{SB} S_i S_j + h \sum S_i.$$

Вместо температуры t удобнее рассматривать безразмерную величину

$$T = kt/J_B,$$

где k — постоянная Больцмана.

Компьютерное моделирование осуществлялось для тонких пленок с линейными размерами $L \times L \times D$, где D — толщина пленки. Система размещалась между двумя плоскостями $z = 0$ и $z = D - 1$. Вдоль направлений осей OX и OY использовались периодические граничные условия. Компьютерное моделирование осуществлялось с помощью алгоритма Метрополиса.

Для описания магнитных свойств системы было введено два параметра порядка: объемный и поверхностный. Поверхностный параметр порядка m_S вычислялся как шахматная намагниченность спинов, расположенных в плоскости $z = 0$. В силу симметрии системы введение второго поверхностного параметра для плоскости $z = D - 1$ лишено смысла. Для описания коллективного поведения остальных спинов, не расположенных на поверхностях, был введен объемный параметр порядка m , который также вычислялся как шахматная намагниченность.

Для обоих параметров порядка вычислялась зависимость куммулянтов Биндера четвертого порядка [11] от температуры:

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad U_S = 1 - \frac{\langle m_S^4 \rangle}{3\langle m_S^2 \rangle^2}.$$

Угловыми скобками обозначено термодинамическое усреднение по состояниям системы.

Согласно теории конечномерного скейлинга [12] значения куммулянтов Биндера при температуре фазового перехода не зависят от размеров системы. Для определения температуры фазового перехода строились графики зависимости куммулянты Биндера для систем различного размера и определялась точка их пересечения, которая соответствует температуре фазового перехода. Для нахождения температуры Нееля T_N использовались куммулянты U , температура поверхностного фазового перехода T_S определялась на основе U_S .

2. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В компьютерном эксперименте исследовались системы с линейным размером от $L = 20$ до $L = 36$ с шагом $\Delta L = 4$. Рассматривались пленки с толщиной от $D = 4$ до $D = 16$ с шагом $\Delta D = 4$. Количество шагов Монте-Карло на спин $8 \cdot 10^5$. Магнитное поле изменялось от $h = 0.0$ до $H = 5.0$ с шагом $\Delta H = 0.5$. Отношение обменных интегралов изменялось от $R = 0.7$ до $R = 1.8$ с шагом $\Delta R = 0.1$.

Как показали расчеты, для фазового перехода в тонких антиферромагнитных пленках наблюдается квадратичная зависимость температуры Нееля от напряженности внешнего магнитного поля. Качественно система демонстрирует такие же закономерности, как и бесконечные и полубесконечные антиферромагнитные системы. На рис. 1 приведена типичная зависимость температуры фазового перехода T_N от напряженности внешнего магнитного поля h для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 12$ при различных значениях отношений обменного интеграла R . При других значениях толщины пленки D зависимости температуры от магнитного поля качественно имеют такой же вид.

Общая зависимость температуры фазового перехода T_N от напряженности магнитного поля h может

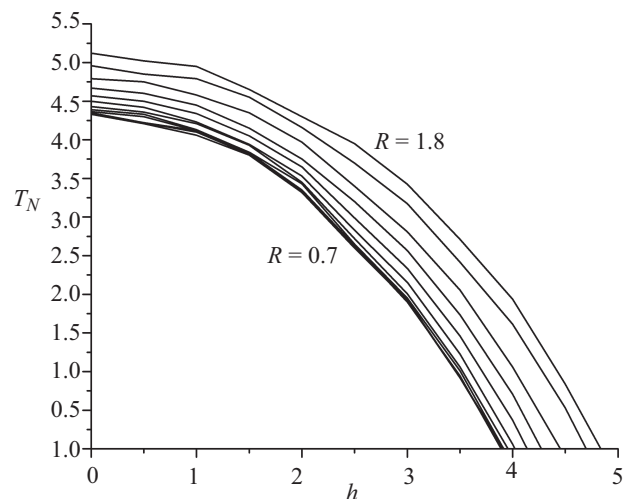


Рис. 1. Зависимость температуры фазового перехода T_N от напряженности внешнего магнитного поля h для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 12$ при отношениях обменного интеграла от $R = 0.7$ до $R = 1.8$

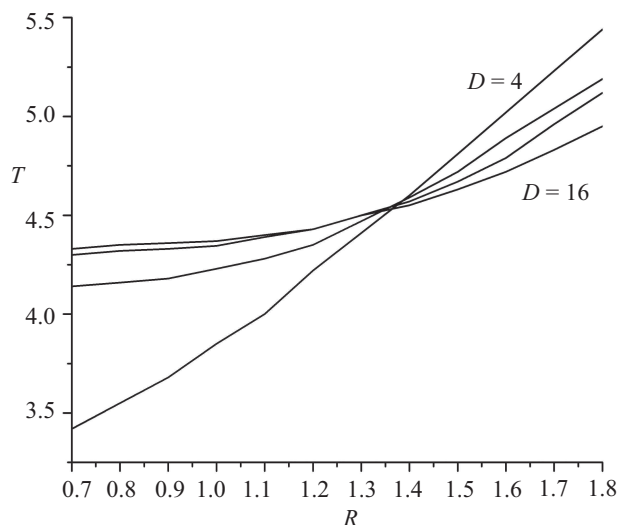


Рис. 2. Зависимость температуры фазового перехода T_0 в нулевом внешнем магнитном поле от отношения обменных интегралов R для пленок толщиной от $D = 4$ до $D = 16$

быть описана в виде соотношения

$$T_N = T_0(R, D) \left(1 - \left(\frac{h}{h_0(D, R)} \right)^2 \right).$$

Здесь $T_0(D, R)$ — температура фазового перехода пленки толщиной D с отношением обменных интегралов R в нулевом внешнем магнитном поле, $h_0(D, R)$ — предельное значение внешнего магнитного поля, при котором температура фазового перехода принимает нулевое значение. Зависимость температуры фазового перехода в нулевом магнитном поле от отношения обменных интегралов R приведена для пленок различной толщины D на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что температура фазового перехода растет с увеличением значения отношения обменных интегралов. Эта зависимость объясняется влиянием поверхностной энергии взаимодействия спинов на систему в целом. Также следует отметить уменьшение скорости роста температуры с увеличением толщины пленки. Эта зависимость объясняется уменьшением влияния граничных слоев на упорядоченность спинов в глубине образца. В предельном случае бесконечных и полубесконечных систем температура Нееля основного объема не зависит от энергии взаимодействия спинов на поверхности. При этом поверхностный слой начинает вести себя как самостоятельная система со своей температурой поверхностного фазового перехода. В тонких пленках, рассмотренных в данной статье, поверхностный фазовый переход не наблюдался. Вопрос о минимальной толщине пленки, при которой происходит поверхностный фазовый переход, остается открытым.

Зависимость предельного значения внешнего магнитного поля от отношения обменных интегралов для пленок различной толщины приведена на рис. 3.

Из графиков на рис. 3 видно, что предельное значение напряженности магнитного поля растет с увеличением отношения обменных интегралов. При увеличении толщины пленки кривая роста предельного значения напряженности магнитного поля

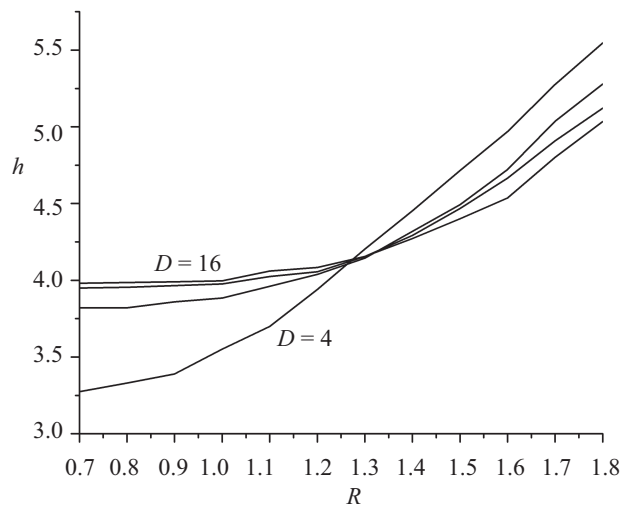


Рис. 3. Зависимость предельного значения напряженности внешнего магнитного поля h_0 от отношения обменных интегралов R для пленок толщиной от $D = 4$ до $D = 16$

Таблица. Значения коэффициентов $A(D)$ и $B(D)$.

D	$A(D)$	$B(D)$
4	2.72 ± 0.02	0.87 ± 0.04
8	3.21 ± 0.03	0.59 ± 0.02
12	3.28 ± 0.02	0.57 ± 0.03
16	3.32 ± 0.01	0.55 ± 0.01

становится более пологой и стремится к горизонтальной прямой $h_0 = 4.0$, характерной для бесконечных систем. Кривая зависимости h_0 от R с высокой точностью может быть аппроксимирована квадратичной функцией:

$$h_0(D, R) = A(D) + B(D)R^2.$$

Значения коэффициентов $A(D)$ и $B(D)$ приведены в таблице.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, внешнее магнитное поле оказывает на тонкие пленки такое же влияние, как и на любую антиферромагнитную систему. Температура Нееля снижается под действием магнитного поля по квадратичному закону. Скорость убывания температуры в зависимости от напряженности магнитного поля зависит от толщины пленки. Также от толщины пленки зависит и скорость роста температуры Нееля при увеличении поверхностного обменного интеграла. Этот эффект наблюдался экспериментально в работах [13–15]. Во всех этих экспериментах наблюдается рост температуры фазового перехода с увеличением толщины пленки, что соответствует значениям $R < 1.38$.

Эффект снижения температуры фазового перехода в антиферромагнитных пленках под действием внешнего магнитного поля также подтверждается экспериментально. Так, например, в статье [16] показано, что в тонких пленках $\text{ViFe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{O}_3$ под действием магнитного поля температура Нееля снижается от значения 630 К до комнатных температур. Экспериментально фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки FeF_2 во внешнем магнитном поле

была получена в работе [17]. Зависимость температуры Нееля от внешнего магнитного поля качественно совпадает с результатами данной статьи и имеет вид, близкий к квадратичной функции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lin C.-Yu., Li J.-L., Hsieh Y.-H. et al. // Phys. Rev. X. 2012. **2**. 021012.
2. Hamedoun M., Bouslykhane K., Bakrim H. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2006. **301**. P. 22.
3. Белим С.В., Трушникова Е.В. // Письма о материалах. 2018. **4**. С. 440. (Belim S. V., Trushnikova E. V. // Letters on Materials. 2018. **8**, N 4. P. 440.)
4. Белим С.В., Трушникова Е.В. // Физика металлов и металловедение. 2018. **119**, №5. С. 465. (Belim S. V., Trushnikova E. V. // Physics of Metals and Metallography. 2018. **119**, N 5. P. 441)
5. Белим С.В., Трушникова Е.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2018. **9**. С. 102. (Belim S. V., Trushnikova E. V. // Journal of Surface Investigation. 2018. **12**, N 5. P. 923.)
6. Monroe J. L. // Phys. Rev. E. 2001. **64**. 016126.
7. Wu X. N., Wu F. Y. // Phys. Lett. A. 1990. **144**. P. 123.
8. Blote H. W. J., Wu X. N. // J. Phys. A. 1990. **23**. P. L627.
9. Wang X.-Z., Kim J. S. // Phys. Rev. Lett. 1997. **78**. P. 413.
10. Tarasenko A. A., Jastrabik L., Nieto F. et al. // Phys. Rev. B. 1999. **59**. P. 8252.
11. Binder K. // Phys. Rev. Lett. 1981. **47**. P. 693.
12. Landau D. P., Binder K. // Phys. Rev. B. 1978. **17**. P. 2328.
13. Yadav K., Singh H. K., Maurya K. K. et al. // Applied Physics A. 2018. **124**. P. 66.
14. Yadav K., Singh M. P., Razavi F. S. et al. // Mater. Chem. Phys. 2012. **137**. P. 323.
15. Dagotto E., Hotta T., Moreo A. // Phys. Rep. 2001. **344**. P. 1.
16. Amirov A. A., Chaudhari Y. A., Bendre S. T. et al. // Eur. Phys. J. B. 2018. **91**. P. 63.
17. Carrico A. S., Camley R. E., Stamps R. L. // Phys. Rev. B. 1994. **50**. N 18, P. 13453.

The Influence of a Magnetic Field on Phase Transition in Antiferromagnetic Films: Computer Modeling Research

S. V. Belim^a, I. B. Larionov

Siberian State Automobile and Highway University. Omsk, 644080, Russia.

E-mail: ^asbelim@mail.ru.

The influence of an external magnetic field on the phase-transition temperature for antiferromagnetic thin films is investigated. The computer modeling method for the antiferromagnetic Ising model with a thin film geometry is used. Films with thicknesses from 4 to 16 layers have been investigated. It is shown that the temperature of the antiferromagnetic phase transition decreases according to the square law as the external magnetic intensity increases. The rate of decrease of the phase-transition temperature depends on the film thickness and on the relationship between the exchange integrals on the surface and the bulk of the system. For each system, there is a limit value of the magnetic intensity such that no antiferromagnetic phase transition occurs if it is exceeded. The dependence of the limit value of the magnetic intensity on the relationship between the exchange integrals obeys the square law as well.

Keywords: Ising model, thin films, Neel temperature, antiferromagnetics.

PACS: 68.35.Rh.

Received 12 August 2019.

English version: [Moscow University Physics Bulletin. 2019. 74, No. 6. Pp. 646–649.](#)

Сведения об авторах

1. Белим Сергей Викторович — доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (3812) 62-80-90, e-mail: sbelim@mail.ru.
2. Ларионов Игорь Борисович — канд. техн. наук, доцент; тел.: (3812) 62-80-90, e-mail: LarionovIB@omsu.ru.