

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

Мальцев Иван Валерьевич

**МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ 1D И  
2D МАГНЕТИКОВ НА НЕМАГНИТНОЙ ПОДЛОЖКЕ**

Специальность 1.3.8.

Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физ.-мат. наук, профессор  
Бычков Игорь Валерьевич

Челябинск — 2024

## Оглавление

|   | Стр.      |
|---|-----------|
| Введение . . . . .  | 4         |
| <b>Глава 1. Моделирование критических явлений в магнетиках . . . . .</b>  | <b>22</b> |
| 1.1 Численный эксперимент методом Монте-Карло . . . . .   | 22        |
| 1.1.1 Классический метод Монте-Карло . . . . .  | 22        |
| 1.1.2 Модель Изинга . . . . .   | 25        |
| 1.1.3 XY-модель . . . . .   | 26        |
| 1.1.4 Модель Гейзенберга . . . . .  | 27        |
| 1.2 Изучение критических явлений методом Монте-Карло . . . . .  | 28        |
| 1.2.1 Теория конечно-размерного масштабирования . . . . .   | 29        |
| 1.2.2 Погрешность метода Монте-Карло . . . . .  | 31        |
| 1.2.3 Критическое замедление алгоритма Метрополиса . . . . .  | 35        |
| 1.2.4 Кластерные алгоритмы Монте-Карло . . . . .  | 35        |
| 1.3 Модель Френкеля-Конторовой . . . . .  | 37        |
| <b>Глава 2. Монте-Карло моделирование фазового перехода в<br/>квазиодномерном мультиферроике на подложке . . . . .</b>                      | <b>41</b> |
| 2.1 Квазиодномерный мультиферроик $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ . . . . .   | 41        |
| 2.2 Монте-Карло модель квазиодномерного мультиферроика<br>$\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ . . . . .   | 44        |
| 2.3 Результаты моделирования . . . . .  | 47        |
| 2.3.1 Моделирование без подложки . . . . .  | 47        |
| 2.3.2 Моделирование с учётом влияния подложки . . . . .   | 54        |
| 2.4 Выводы по главе . . . . .   | 57        |
| <b>Глава 3. Фазовый переход и магнитоэлектрический эффект в<br/>2D–ферромагнитной пленке на сегнетоэлектрической<br/>подложке . . . . .</b> | <b>59</b> |
| 3.1 Магнитоэлектрический эффект в тонких ферромагнитных<br>плёнках на подложке . . . . .  | 59        |

|   | Стр.       |
|---|------------|
| 3.2 Монте–Карло модель 2D–ферромагнитной пленки на сегнетоэлектрической подложке . . . . .                    | 60         |
| 3.2.1 Результаты моделирования . . . . .  | 63         |
| 3.2.2 Теория среднего поля . . . . .  | 67         |
| 3.3 Выводы по главе . . . . .   | 70         |
| <b>Глава 4. Исследование влияния подложки на критическое поведение двухмерного ферромагнетика . . . . .</b>   | <b>72</b>  |
| 4.1 Постановка задачи . . . . .   | 72         |
| 4.2 Компьютерный эксперимент . . . . .  | 77         |
| 4.3 Выводы по главе . . . . .   | 79         |
| <b>Глава 5. Влияние магнитного поля и температуры на магнитную структуру 2D-магнетика на подложке . . . .</b> | <b>81</b>  |
| 5.1 Магнитные скирмионы . . . . .   | 81         |
| 5.2 Монте-Карло модель кубического нецентросимметричного 2D-магнетика . . . . .                               | 84         |
| 5.3 Учёт влияния подложки . . . . .   | 92         |
| 5.4 Выводы по главе . . . . .   | 93         |
| <b>Заключение . . . . .</b>   | <b>94</b>  |
| <b>Благодарности . . . . .</b>  | <b>96</b>  |
| <b>Список литературы . . . . .</b>  | <b>97</b>  |
| <b>Публикации автора по теме диссертации . . . . .</b>  | <b>116</b> |

## Введение

В настоящее время большой интерес у исследователей вызывают электронные и электродинамические свойства наноструктур и металлоповерхностей на основе одномерных (1D) и двумерных (2D) материалов. Это вызвано приближением к пределу своих возможностей электронных компонентов на основе традиционных материалов, таких как кремний или германий. Постоянное уменьшение размеров компонентов вплоть до нескольких нанометров приводит к необходимости учитывать квантово-механические эффекты. Вместе с этим достижение физического предела скорости распространения сигнала и рост рассеиваемой мощности, обусловленный ростом скорости переключения, ограничивает дальнейшее использование традиционных полупроводников.

Долгое время интерес к изучению 1D-материалов был обусловлен простотой одномерной системы и стремлением на её основе лучше понять теорию трехмерных фазовых переходов. В отличие от трёхмерных магнетиков, в которых критическое поведение наблюдается в узком температурном диапазоне вблизи точки Кюри, в 1D-магнетиках возникает сильный близкодействующий порядок при приближении к нулевой температуре. Это делает 1D-магнетики интересными с точки зрения изучения критических явлений в широком диапазоне температур [1]. Развитие технологий позволяет создавать различные одномерные и квазиодномерные магнитные наноструктуры, которые могут применяться, например, для поглощения микроволнового излучения [2].

Двумерные материалы обладают широким спектром электронных свойств, начиная от диэлектрика - гексагонального нитрида бора ( $h$ -BN), полупроводников - черного фосфора и дихалькогенидов переходных металлов, таких как дисульфид молибдена ( $\text{MoS}_2$ ) и диселенид вольфрама ( $\text{WSe}_2$ ), до полуметаллического графена. Интерес представляет также тот факт, что 2D-материалы проявляют отличные от трехмерных кристаллов свойства. Самый известный пример, он же первый полученный двумерный материал - графен, который является полупроводником с запрещённой зоной нулевой ширины, тогда как графит является полуметаллом с перекрытыми зонами [3]. Более того, изучение казалось бы понятных явлений, таких как сверхпроводимость или ферромагнетизм в 2D-материалах, где нет дальнего порядка, вызывает множество вопросов.

За последние годы многократно выросло число известных 2D-материалов, а также гетероструктур, созданных на их основе путём соединения различных одноатомных слоёв слабым Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием. Такие гетероструктуры могут проявлять ещё больший спектр новых свойств, чем одиночные 2D-слои [4–8]. Однако, несмотря на широкий спектр известных двумерных материалов, первые 2D-магнетики были получены совсем недавно, в 2017 году [9; 10], хотя слоистые магнитные кристаллы были известны довольно давно [11; 12]. Первыми полученными 2D-магнетиками стали  $\text{CrI}_3$  и  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ , причем они хорошо описываются двумерной моделью Изинга и моделью Гейзенберга соответственно. При уменьшении числа слоёв  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  уменьшается и температура Кюри, монослой  $\text{CrI}_3$  сохраняет ферромагнитное (ФМ) упорядочение вплоть до 45 К, причем два монослоя  $\text{CrI}_3$  показывают антиферромагнитное (АФМ) упорядочение, а три слоя вновь ФМ.

Размерность играет существенную роль в определении влияния тепловых флуктуаций на критическое поведение многочастичных систем [13]. В трехмерной системе магнитный фазовый переход всегда может происходить при конечной температуре, тогда как в 1D-случае дальнедействующий порядок возможен только при  $T = 0$  [14]. Находясь между этими двумя крайностями, ситуация в 2D-системах более сложная. В этом случае наличие дальнего магнитного порядка при любой конечной температуре зависит от числа  $n$  соответствующих спиновых компонент, обычно называемых спиновой размерностью (рис. 1), и определяется физическими параметрами системы (например, наличием магнитной анизотропии).

Существует теорема Мермина-Вагнера-Березинского (или теорема Мермина-Вагнера-Хоэнберга) [15; 16], которая утверждает, что тепловые флуктуации разрушают дальний магнитный порядок в 2D-системах при любой конечной температуре, когда размерность спина равна 3 (изотропная модель Гейзенберга [17]). Непрерывная симметрия изотропной модели приводит к тому, что спиновые волны могут быть легко возбуждены в любом направлении при любой конечной температуре, что отрицательно сказывается на магнитном порядке. Напротив, точное решение 2D-модели Изинга [18] показывает, что фазовый переход в магнитоупорядоченную фазу происходит при  $T_C > 0$  (при  $n = 1$ ). В этом случае анизотропия системы благоприятствует определенной спиновой составляющей. В спектре спиновых волн появляется щель, подавляя тем самым эффект тепловых флуктуаций.

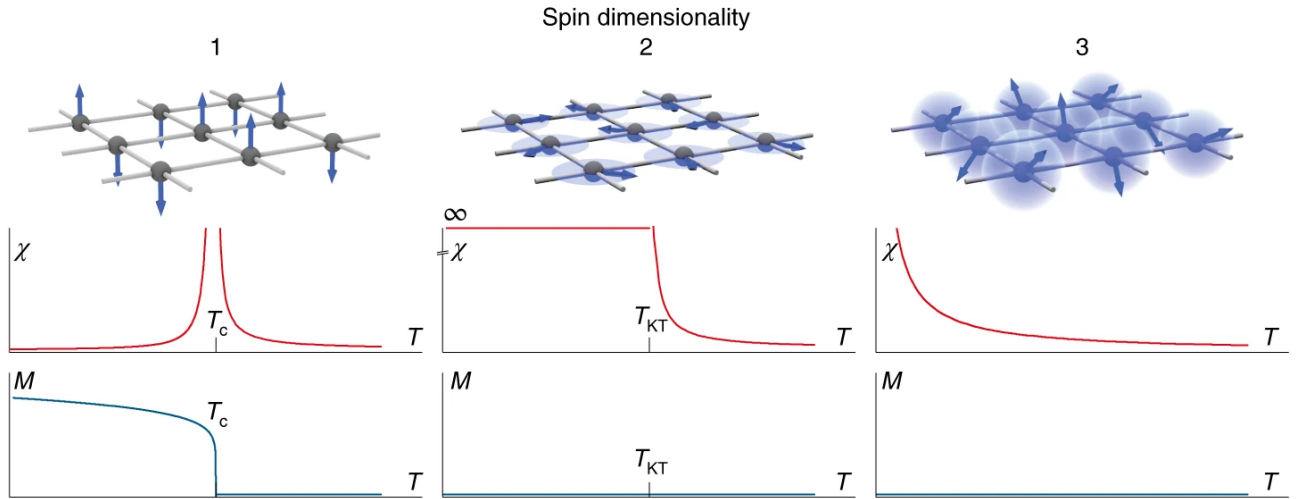


Рисунок 1 — Роль размерности спина на формирование магнитного порядка [13]

Для 2D-магнетиков ( $n = 2$ ), удобно описываемых XY моделью, нет обычного перехода к дальнедействующему порядку, хотя восприимчивость расходитсся ниже конечной температуры. В работах [19; 20] показано, что это расхождение связано с наступлением топологического порядка, характеризующегося затуханием спиновых корреляций и наличием связанных пар вихревых и антивихревых расположений спинов. Таким образом, ниже температуры Костерлица—Таулеса  $T_{KT}$  устанавливается квазидлиннодействующий магнитный порядок, и существование параметра конечного порядка лишь незначительно уменьшается с размером системы.

Конкуренция различных типов спин-спиновых взаимодействий в 2D-магнетиках может стать причиной возникновения нетривиальных магнитных структур, таких как магнитные скирмионы. Скирмионами называют квазичастицы, которые характеризуются некоторым целым топологическим числом, остающимся неизменным при непрерывной деформации поля. Такие квазичастицы топологически защищены и обладают высокой стабильностью.

Топологическая защищенность магнитных скирмионов является их важнейшим свойством при рассмотрении возможности их практического применения в устройствах спинтроники. Устройства спинтроники в отличие от полупроводников используют в качестве носителя информации не только заряд электрона, но и его спин [21; 22].

Пожалуй наиболее перспективной концепцией устройства, использующего магнитные скирмионы для хранения информации, является трековая память

[23—27]. Это устройство представляет собой магнитные ленты-треки нанометрового масштаба, разделённая на ячейки, в которых скирмионы, располагаясь в определённом порядке, кодируют двоичную информацию: наличие скирмиона в ячейке соответствует единице, а его отсутствие - нулю. Создание и удаление скирмионов в ячейках осуществляется посредством локальной инжекции спин-поляризованного тока в ФМ слой. Предполагается, что устройства трековой памяти будут более быстродействующими и обладать более плотной записью, чем HDD- и SSD-устройства. Помимо устройств хранения информации были предложены различные концепции реализации логических устройств, которые позволяют реализовать булеву алгебру, используя скирмионы [26; 28—31].

Топологическая устойчивость скирмионов является основным, но не единственным их достоинством. Кроме того, управлять скирмионами можно посредством спин-поляризованного тока очень малой плотности [32; 33], что положительно отражается на энергопотреблении устройств. Способы получения одиночных скирмионов нанометрового масштаба исследовались в работах [32—39], формирование скирмионных кристаллов [40—43], движение скирмионов индуцируемое спин-поляризованным током [32; 34; 35; 44], а также способы детектирования [45; 46] и удаления [47] скирмионов.

На корреляционные свойства большинства 2D-материалов существенное влияние оказывает подложка [48]. Влияние подложки становится значительным и при формировании тонких плёнок на немагнитной подложке. Различие кристаллических структур подложки и плёнки может приводить к изменению геометрической структуры плёнки, что может сказываться на термодинамических и магнитных свойствах плёнки [49]. В частности, в системе может наблюдаться смещение точки Кюри. В работе [50] показано, что магнитные свойства плёнки магнитного оксида сильно зависят от состояния сегнетоэлектрической (СЭ) подложки. Регулируя параметры сегнетоэлектрика, авторы демонстрируют фазовый переход из ФМ в парамагнитную фазу. Авторы работы [51] исследуют систему, состоящую из тонкой ФМ плёнки  $\text{Li}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.5$  и  $0.3$ ), нанесённой на СЭ подложку  $\text{BaTiO}_3$ . В этой системе изменение намагниченности происходит во внешнем электрическом поле и сопровождается деформациями системы. ФМ плёнка  $\text{BiFeO}_3$ , нанесённая на подложку  $\text{LaAlO}_3$ , исследована в статье [52]. Деформации плёнки вызваны управляемым фазовым переходом в подложке. В результате изменяется намагниченность и коэрцитивная сила плёнки. В работе [53] исследованы тонкие плёнки  $\text{LaCoO}_3$  и

$\text{LaCo}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{O}_3$  на монокристаллической подложке  $\text{LaAlO}_3$ , нанесённые методом импульсного лазерного осаждения. Управление состоянием подложки позволяет повышать намагниченность плёнок и сохранять их ФМ состояние вплоть до комнатных температур. В статье [54] проведён эксперимент по управлению намагниченностью тонких плёнок  $\gamma\text{-Fe}_{50}\text{Mn}_{50}$ , выращенных на GaAs с помощью деформаций растяжения. Деформации вызваны различием в тепловом расширении плёнки и подложки.

Влияние подложки может быть описано с помощью некоего эффективного периодического поля, которое вносит свой вклад в энергию двумерной системы. Это эффективное поле может быть представлено в виде потенциала Френкеля-Конторовой (ФК) [55; 56]. Потенциал подложки влияет на равновесное расположение атомов двумерного материала, что сказывается на общей геометрии системы. На геометрию системы существенно влияет и коэффициент покрытия, т.е. отношение числа атомов к числу минимумов потенциала. А если эти атомы обладают магнитным моментом, то потенциал подложки может привести, через изменение взаимного расположения спинов, к изменению температуры магнитного фазового перехода.

Наряду с потенциалом подложки, влияние на магнитные свойства и температуру магнитных фазовых переходов может оказывать и внешнее электрическое поле. В работе [57] показано, что в двухслойном  $\text{CrI}_3$  возможно полностью обратимое электрическое управление намагниченностью. Появление макроскопической намагниченности под действием электрического поля, а также возникновение электрической поляризации под действием магнитного поля называется магнитоэлектрическим (МЭ) эффектом.

МЭ эффект позволяет управлять намагниченностью с помощью внешнего электрического поля, что в свою очередь позволяет управлять проводимостью системы за счет эффекта гигантского магнитосопротивления. Гигантский МЭ эффект обычно наблюдается в системах, состоящих из тонкой ФМ пленки, размещенной на сегнетоэлектрической подложке. МЭ эффект в таких системах может проявляться в возможности контролируемых переключений намагниченности за счет влияния магнитоупругой составляющей на энергию магнитной анизотропии. Ещё одним проявлением МЭ эффекта служит смещение температуры Кюри в ФМ пленках под влиянием подложки. Во внешнем электрическом поле происходит деформация СЭ подложки. Атомы подложки взаимодействуют с атомами пленки, в результате чего ФМ пленка также начинает деформи-

роваться, что приводит к смещению температуры Кюри вследствие эффекта магнитострикции. Если поддерживается постоянная температура, то электрическое поле смещает положение системы на фазовой диаграмме относительно точки фазового перехода, что приводит к изменению намагниченности.

Изменение намагниченности тонкой плёнки под влиянием подложки наблюдается экспериментально для различных материалов. Ультратонкие платиновые плёнки на СЭ подложке  $\text{BaTiO}_3$  значительно меняют значение магнитного момента вслед за деформацией подложки под воздействием внешнего электрического поля [58]. МЭ эффект также был обнаружен для пленки никеля на такой же подложке [59]. Изменения в структуре магнитных доменов наблюдалось и для плёнок  $\text{Pt/Co/Ta}$  на различных СЭ подложках при помощи дифракции и отражении рентгеновских лучей [60]. Большая величина МЭ эффекта была отмечена для тонких плёнок  $\text{CoFe}_2\text{O}_3/\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{LaNiO}_3$  на подложке  $\text{Pt/Ti/SiO}_2/\text{Si}$  с совместным существованием СЭ и ФМ фаз [61]. Исследование изменения магнитного момента в пленке  $\text{Ni}_{80}\text{Co}_{20}$  на подложке  $\text{Pb}(\text{Mg, Nb})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$  под влиянием внешнего электрического поля выполнено в работе [62]. В этой работе показано, что изменение намагниченности является следствием деформаций подложки. Большой МЭ эффект  $560 \text{ мВсм}^{-1}\text{Э}^{-1}$  наблюдается в гетероструктуре  $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{LaNiO}_3/\text{Ni}$  [63].  $\text{LaNiO}_3$  служит буферным слоем. Достаточно большой магнитоэлектрический эффект ( $82 \text{ мВсм}^{-1}\text{Э}^{-1}$ ) демонстрируют тонкие пленки  $\text{Ba}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{TiO}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$  на подложках  $\text{Pt/Ti/SiO}_2/\text{Si}$  [64]. ФМ пленки  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  на сегнетоэлектрической подложке  $\text{BaTiO}_3$  демонстрируют снижение температуры Кюри как при растяжении, так и при сжатии [65].

Теоретические исследования МЭ эффекта преимущественно сосредоточены на конкретных веществах. Влияние подложки на магнитные свойства тонких пленок  $\text{BaCoF}_4$  исследовалось на основе микроскопической модели для подложек  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{MgO}$  [66]. Температура фазового перехода и намагниченность уменьшаются вместе со сжатием подложки и увеличиваются при её растяжении. Модифицированная модель Ландау использовалась для исследования флуктуаций намагниченности в двумерных пленках  $\text{RMnO}_3$  ( $\text{R} = \text{Tb, Lu}$  и  $\text{Y}$ ) на СЭ подложке [67].

Кроме МЭ эффекта, возникающего под воздействием внешних полей, существует и спонтанный МЭ эффект в однофазных кристаллах, в которых

наблюдается сосуществование двух типов упорядочения: магнитного и электрического. Такие кристаллы называют *сегнетомагнетиками*.

МЭ эффект в кристаллах обусловлен влиянием внешних воздействий на энергию обменных и спин-орбитальных взаимодействий в кристаллах, связывающих пространственное движение электронов и взаимную ориентацию их магнитных моментов [68].

Помимо спонтанного упорядочения магнитного момента и электрической поляризации, в кристаллах может существовать также спонтанное упорядочение деформации и тороидного момента. В 1969 году японский ученый Кетзаро Аизу назвал такие кристаллы «ферроиками» (ferroelectrics, ferromagnets, ferroelastics) [69]. А в 1993г Шмидом термин был введён *мультиферроик* [70] для обозначения среды, в которой присутствуют одновременно хотя бы два вида упорядочения. Однако практически во всех работах, использующих термин *мультиферроики*, речь идёт о сегнетомагнетиках. На рисунке 2 представлено отношение мультиферроиков и сегнетомагнетиков.

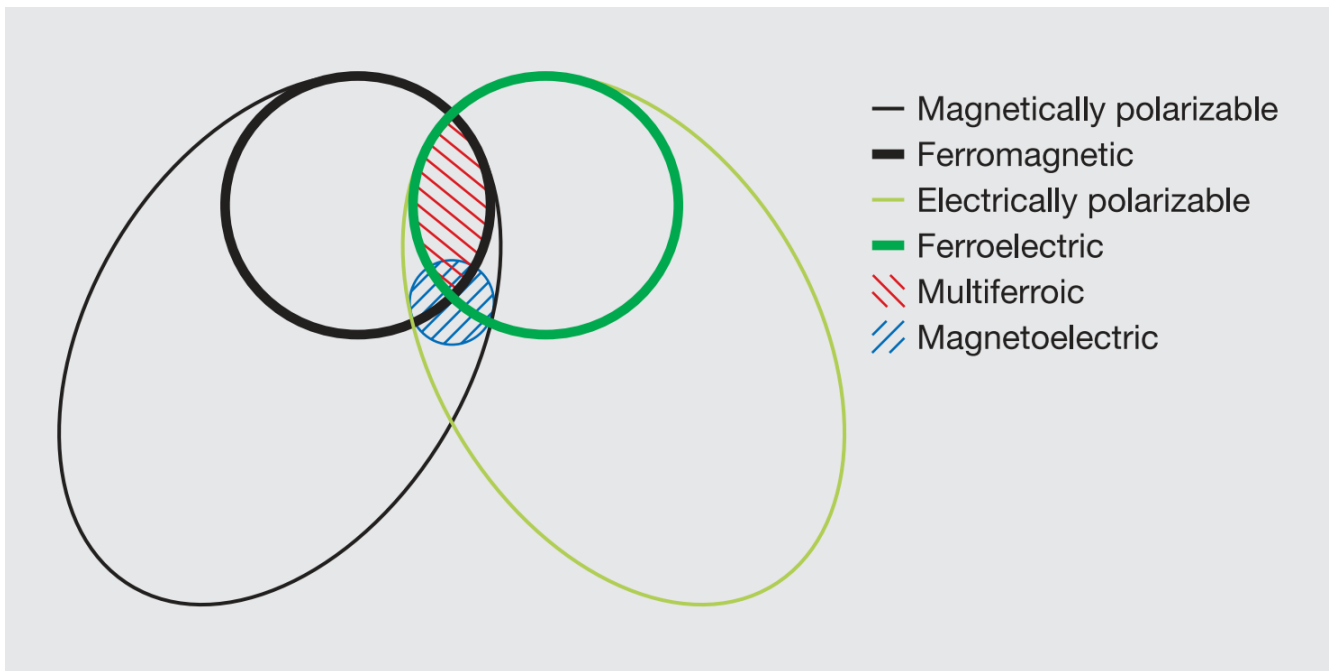


Рисунок 2 — Отношение между материалами мультиферроиками и сегнетомагнетиками [71].

Ферромагнетики (сегнетоэлектрики) образуют подмножество магнитно (электрически) поляризуемых материалов, таких как парамагнетики и антиферромагнетики (параэлектрики и антисегнетоэлектрики). Пересечение (красная

штриховка на рисунке 2) представляет материалы мультиферроики. Магнито-электрическая связь (синяя штриховка на рисунке 2) - это независимое явление, которое может возникать в любом из материалов, которые являются как магнитно, так и электрически поляризуемыми. На практике он может возникать во всех таких материалах либо непосредственно, либо через деформацию.

По способу возникновения мультиферроидного состояния можно выделить 3 основные группы мультиферроиков: однофазные мультиферроики, представленные, главным образом, сложными оксидами; композиты различной связности; наносегнетоэлектрические материалы, в которых возникновение магнетизма связано с поверхностными эффектами.

По структурным признакам мультиферроики можно разделить на несколько основных типов [72]:

1. Соединения со структурой типа перовскита  $ABO_3$ . Сегнетоэлектрическому упорядочению благоприятствует наличие в подрешетке А ионов с неподеленной парой  $6s$ -электронов, а в подрешетке В - ионов переходных элементов с оболочкой благородного газа после удаления  $s$ - и  $d$ -электронов. Для удовлетворения условий, необходимых для возникновения сегнетомагнетизма, в октаэдрические позиции были введены ионы, одни из которых были сегнетоактивными, другие - магнитными [73].

Наиболее изученным и перспективным мультиферроиком-перовскитом является феррит висмута  $BiFeO_3$ , соединениям на основе которого посвящено около трети всех работ по исследованию свойств мультиферроиков [74]. Он обладает высокими температурами электрического и магнитного упорядочений, простой кристаллической структурой и большим разнообразием свойств (в нем реализуются практически все типы МЭ взаимодействий).

2. Гексагональные редкоземельные манганиты с общей формулой  $RMnO_3$ , где R - редкоземельный металл (Y, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Sc, In). Гексагональная структура в этих соединениях возникает вследствие малости ионных радиусов редкоземельных ионов и наличия ковалентных связей Mn-O. В отличие от перовскитов их кристаллическая структура несимметрична.

Гексагональные манганиты принадлежат к классу сегнетомагнетиков, в которых температура перехода в ферроэлектрическое состояние  $T_C \sim$

600 – 900 К намного выше температуры АФМ упорядочения  $T_N \sim 70 - 130$  К [72].

Орторомбические манганиты  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  (R- редкоземельные ионы от Rr до Lu, Y или Bi) являются магнитоэлектриками, обладающими одновременно АФМ и ферроэлектрическим дальним порядком с близкими температурами Нееля и Кюри  $T_N, T_C \sim 30 - 40$  К [75]. Существенным отличием орторомбических манганатов от манганитов  $\text{RMnO}_3$  является разная валентность ионов марганца. Конкуренция обменных взаимодействий  $\text{Mn}^{3+}\text{-Mn}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{4+}\text{-Mn}^{4+}$  и  $\text{Mn}^{3+}\text{-Mn}^{4+}$  приводит к наличию близких энергетических состояний и разнообразным фазовым переходам между ними, сопровождаемым изменениями электрической поляризации [76].

3. Редкоземельные бораты с общей химической формулой  $\text{RM}_3(\text{BO}_3)_4$ , где R - редкоземельный элемент, M - ион металла (в случае  $\text{M}=\text{Fe}$  соединения называют ферроборатами,  $\text{M}=\text{Al}$ , Cr соответственно, алюмоборатами и хромоборатами). При высоких температурах кристаллизуются в тригональную структуру хантита  $\text{CaMn}_3(\text{CO}_3)_4$ .

Ионы металла M окружены шестью ионами кислорода O, которые формируют слегка искаженный октаэдр. Каждый из октаэдров имеет два общих ребра с соседними по оси c октаэдрами, формируя, таким образом, геликоидальную (винтовую) цепочку вдоль оси c. Редкоземельный элемент R заключен в немного скрученную призму с треугольным основанием, сформированную шестью ионами кислорода, которые также принадлежат трем геликоидальным цепочкам. Кроме того, геликоидальные цепочки связаны друг с другом посредством бор-кислородных треугольников  $\text{BO}_3$ .

В ферроборатах  $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$  присутствует две магнитные подсистемы: подсистема ионов железа и редкоземельных ионов. Первая является квазиодномерной и антиферромагнитно упорядочивается при температуре Нееля  $T_N=30\text{-}40\text{K}$ . Несмотря на то, что цепочки железа формируют квазиодномерную структуру, в редкоземельных ферроборатах реализуется трехмерный АФМ порядок. В ферроборате иттрия, где  $\text{Y}^{3+}$  - немагнитный ион, ниже температуры Нееля ( $T_N=38$  К) магнитные моменты железа упорядочиваются антиферромагнитно вдоль оси третьего порядка и ферромагнитно в плоскости  $ab$  [77], то

есть реализуется легкоплоскостная анизотропия. Магнитная структура ферробората иттрия  $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$  изображена на рисунке 3. Кристаллическая структура ферроборатов такова, что обменное взаимодействие между ионами железа доминирует над обменом в редкоземельной подсистеме.

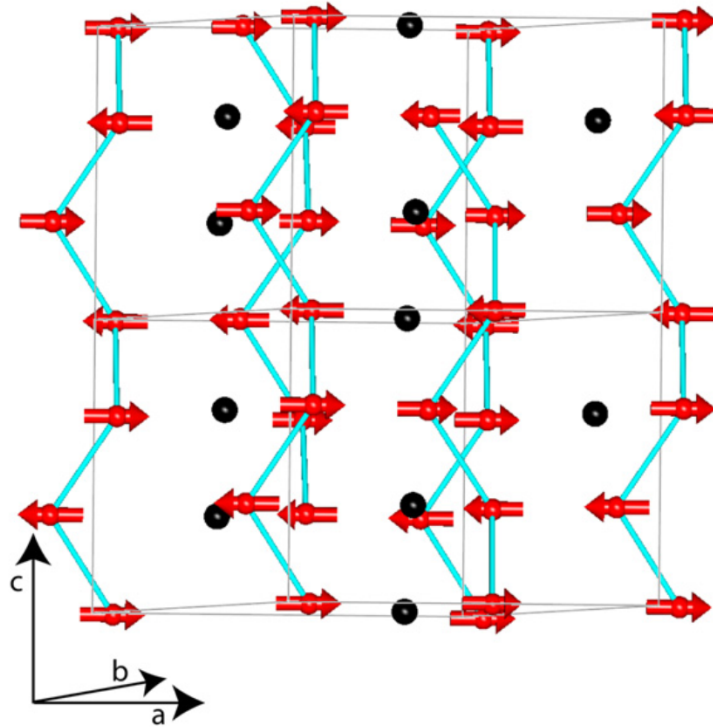


Рисунок 3 — Структура магнитных подсистем  $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$ . Спины железа обозначены красными стрелками, геликоидальные цепочки взаимодействия Fe-Fe обозначены голубыми линиями. Атомы Y обозначены чёрными сферами [77].

В соединениях с большим ионным радиусом ( $R=\text{La, Ce, Pr, Nd, Sm}$ ) тригональная структура остается неизменной вплоть до самых низких температур, в то время как у соединений с меньшим ионным радиусом ( $R=\text{Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er}$ ) имеет место структурный фазовый переход, температура которого возрастает с уменьшением ионного радиуса.

4. Орторомбические соединения  $\text{BaMF}_4$  ( $M=\text{Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Mg}$ ). В этой базоцентрированной ромбической структуре катион металла M окружён шестью ионами фтора, образуя октаэдрическую ячейку. Четыре из шести ионов фтора являются общими с соседними октаэдрами, тем самым образуя плоскость, перпендикулярную к ромбической оси  $b$ . Эти плоскости разделены между собой катионами Ba. Схематически структура  $\text{BaMnF}_4$  показана на рисунке 4. Структура поляризована

вдоль оси  $c$  и сегнетоэлектрическое переключение было выявлено для  $M=\text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}, \text{Mg}$ , но не для  $M=\text{Mn}$  и  $\text{Fe}$  [78]. Диэлектрическая проницаемость росла с температурой, что характерно для сегнетоэлектрического фазового перехода, но все кристаллы таяли до того, как произойдёт переход в параэлектрическую фазу. Температура плавления составляет  $720\text{-}965\text{ }^\circ\text{C}$ , температура фазового перехода, полученная экстраполяцией температурной зависимости диэлектрической постоянной с помощью закона Кюри-Вейса, варьируется от  $810$  до  $1320\text{ }^\circ\text{C}$  [79].

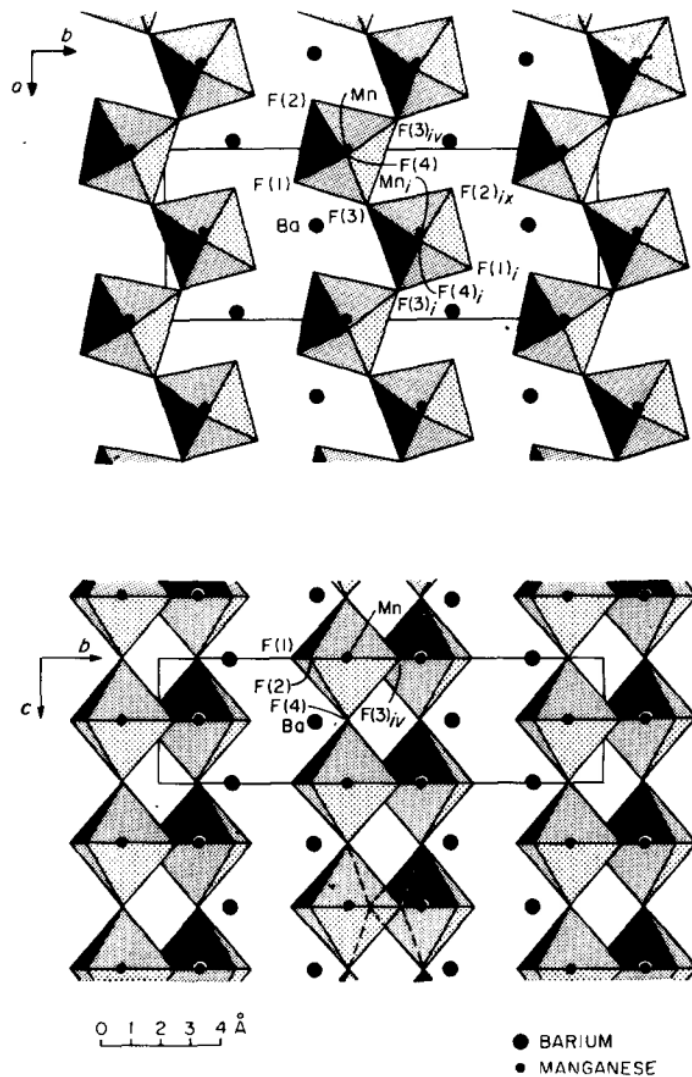


Рисунок 4 — Структура  $\text{BaMnF}_4$ : вдоль оси  $c$  (вверху) и вдоль оси  $a$  (внизу) [80].

Вдобавок к искривлению поляризации, в соединениях с  $M=\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$  проявляется АФМ упорядочение при температурах ниже  $T_N \approx 20\text{-}80\text{ K}$  [81].

Соединения  $BaMF_4$  не содержат ионов, который обычно связаны с появлением сегнетоэлектричества, таких как катионы с пустыми электронными  $d$ -оболочками или несвязные активные катионы (например,  $Bi^{3+}$ ,  $Pb^{2+}$ ). Возникновение сегнетоэлектричества в этих соединениях связано с замораживанием одиночных нестабильных поляризованных мод фононов, которые включают в себя вращательное движение фторовых октаэдров и смещение катионов Ba [82]. Нестабильность вызвана исключительно размерными эффектами и геометрическим строением, переноса заряда между анионами и катионами нет.

В современной литературе чаще используют классификацию Хомского [83]. Она делит мультиферроики на 2 типа по видам микроскопического механизма, определяющего их свойства. К I типу относятся мультиферроики, в которых сегнетоэлектричество и магнетизм имеют разную природу и мало зависят друг от друга. В таких материалах как правило сегнетоэлектрические свойства появляются при более высоких температурах, нежели магнетизм, а спонтанная поляризация довольно высока (10 - 100 мкКл/см<sup>2</sup>). Эти материалы были открыты первыми, они более многочисленны и являются хорошими сегнетоэлектриками, а температуры магнитного и сегнетоэлектрического фазовых переходов могут быть выше комнатных. Однако взаимодействие между магнитной и электрической подсистемах в них обычно крайне слабое.

Ко II типу мультиферроиков относятся материалы, в которых сегнетоэлектричество возникает под действием магнетизма. Такие материалы были открыты гораздо позже [84; 85]. Взаимодействие между подсистемами гораздо сильнее, чем у мультиферроиках I типа, однако поляризация в таких материалах намного меньше ( $\sim 10^{-2}$  мкКл/см<sup>2</sup>). Мультиферроики II типа можно поделить на 2 группы: со спиральной ( $TbMnO_3$ ,  $Ni_3V_2O_6$ ,  $MnWO_4$ ) и с коллинеарной магнитной структурой ( $Ca_3CoMnO_6$ ).

Однако практическое применение однофазных сегнетомагнетиков затрудняется небольшой величиной МЭ эффекта (до 20 мВ/(см·Э)), а также низкой температурой, при которой наблюдается этот эффект в виду низких температур Нееля и Кюри.

Термодинамическое рассмотрение ограничивает эффективность МЭ взаимодействия соотношением [86]:

$$\alpha_{ij}^2 < \varepsilon_{ij} \mu_{ij} \quad (1)$$

Таким образом, появление большого МЭ эффекта возможно только в веществах с большими величинами  $\varepsilon_{ij}$  и  $\mu_{ij}$ , то есть в композитах на основе ферромагнетиков и сегнетоэлектриков.

Как было описано выше, немагнитная подложка может существенно влиять на магнитные свойства и критическое поведение ФМ плёнки. Однако большинство исследований в данной сфере сосредоточены на конкретных материалах. Общий же подход к описанию подобных явлений является недостаточно разработанным, что обосновывает актуальность темы диссертационной работы.

**Целью** данной работы является выявление закономерностей влияния немагнитной подложки, внешних магнитных и электрических полей на магнитные свойства 1D и 2D-магнетиков.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Разработка программ для ЭВМ, с помощью которых можно проводить исследование влияния немагнитной подложки в виде периодического потенциала Френкеля-Конторовой на свойства 1D и 2D-магнетиков.
2. Изучение свойств 1D-мультиферроика, таких как электрическая поляризация и температура магнитного фазового перехода под влиянием подложки.
3. Изучение влияния внешнего электрического поля на структуру и свойства 2D-магнетика на сегнетоэлектрической подложке вблизи фазового перехода.
4. Изучение влияния параметров системы, таких как коэффициент покрытия (отношение числа атомов магнетика к числу минимумов потенциала подложки) и амплитуды потенциала на температуру магнитного фазового перехода и критические индексы 2D-магнетика на немагнитной подложке.
5. Исследование влияния температуры, внешнего магнитного поля и немагнитной подложки на свойства 2D-магнетика со скирмионной структурой.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Температурные зависимости поляризации 1D-мультиферроика во внешнем магнитном поле с учётом потенциала подложки. Введение периодического потенциала подложки разрушает магнитную структуру,

- уменьшает поляризацию 1D-мультиферроика и сдвигает температуру магнитного фазового перехода.
2. Зависимости намагниченности и температуры фазового перехода от внешнего электрического поля. Деформация подложки под воздействием внешнего электрического поля приводит к уменьшению температуры Кюри. При слабых полях полученные зависимости имеют линейный вид, что соответствует аналитическим выражениям согласно теории среднего поля. Нелинейный характер зависимостей намагниченности и температуры фазового перехода в сильных полях связан с возникновением неоднородных деформаций в 2D-магнетике.
  3. Зависимости температуры фазового перехода и критических индексов от периода потенциала подложки для двумерной модели Изинга. Если отличие периода потенциала подложки от межатомного расстояния в магнетике не превышает 5%, зависимость температуры фазового перехода имеет линейный характер и совпадает с аналитическим выражением для коэффициента покрытия равного единице. В случае превышения периода потенциала межатомного расстояния в магнетике более чем на 5% происходит перестройка кристаллической структуры магнетика, сопровождающаяся резким скачком температуры фазового перехода и критических индексов.
  4. Температурные зависимости параметра порядка скирмионной 2D-структуры с учётом потенциала подложки. Потенциал подложки приводит к снижению температуры разрушения скирмионной структуры. Внешнее магнитное поле нарушает периодичность магнитной структуры, в результате чего образуются одиночные скирмионы.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые получены температурные зависимости поляризации 1D-мультиферроика при различных параметрах потенциала Френкеля-Конторовой.
2. Впервые получена зависимость смещения температуры фазового перехода в 2D-магнетике на СЭ подложке под действием внешнего электрического поля, и проведено её сравнение с аналитическим выражением, полученным с помощью теории среднего поля.

3. Впервые получены зависимости температуры Кюри и критических индексов 2D-магнетика от параметров периодического потенциала подложки, и проведено сравнение полученных зависимостей с выражением для температуры фазового перехода в линейном приближении.
4. Впервые проведена оценка влияния немагнитной подложки и внешнего магнитного поля на скирмионную структуру 2D-магнетика.

**Практическая значимость.** Полученные результаты являются новыми и вносят вклад в понимание особенностей влияния подложки на магнитные свойства 1D и 2D-материалов, что может быть применено при создании низкоразмерных материалов для устройств спинтроники, стрейнтроники и магноники. Полученные зависимости температуры фазового перехода и критических индексов 2D-магнетика от параметров потенциала подложки могут быть полезными при изготовлении двумерных материалов, сохраняющих спонтанную намагниченность при более высоких температурах.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается использованием известных приближений теории магнетизма, теории упругости, ясным физическим объяснением полученных результатов. Численные эксперименты проводились при помощи хорошо апробированного метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса и алгоритма Вольфа. Корректность полученных результатов проверена сравнением с ранее известными выводами и экспериментальными результатами.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

- VIII International Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» (EASTMAG-2022) (Kazan, Russia, 2022),
- Дни калорики в Королёве: функциональные материалы и их приложения (Королёв, Россия, 2022),
- Дни калорики в Дагестане: функциональные материалы и их приложения (Дербент, Россия, 2023),
- Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах (Махачкала, Россия, 2023),
- XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-23) (Екатеринбург, Россия, 2023)

Диссертационная работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 20-07-00053, 20-37-70038, РНФ 20-19-00745, 22-19-00355; Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания №075-00992-21-00.

**Личный вклад.** Автор принимал участие в постановке задач, анализе и интерпретации полученных результатов, формулировке основных выводов. Разработка теоретических моделей, аналитические и численные расчёты проводились совместно с соавторами И.В. Бычковым, С.В. Белимом, Д.А. Кузьминым. Написание программ для численного моделирования выполнено автором лично. Автор принимал участие в подготовке результатов исследований к публикации и их представлении на научных конференциях, причем вклад диссертанта был определяющим.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 печатных изданиях, 1 из которых издано в журнале, рекомендованном ВАК, 4 — в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 5 — в сборниках трудов конференций.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 117 страниц, включая 37 рисунков и 2 таблицы. Список литературы содержит 204 наименований.

#### **Основное содержание работы.**

Во введении представлен обзор имеющихся на сегодняшний день экспериментальных и теоретических работ в области исследования 1D и 2D-материалов во внешних полях и тонких ФМ плёнок на немагнитной подложке, а также обзор литературы по исследуемым эффектам, приведено обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, положения, выносимые на защиту, отмечена научная новизна и практическая значимость исследования, кратко изложена структура и содержание работы. Кроме того, приведены сведения о публикациях и апробации работы.

В первой главе рассмотрены используемые методы и теории, с помощью которых проведено диссертационное исследование. Рассмотрены классические и кластерные методы Монте-Карло применительно к наиболее популярным моделям магнетиков (модель Изинга, XY и Гейзенберга). Описано исследование критических явлений методом Монте-Карло, теория конечно-размерного масштабирования, учитывающая эффекты конечных размеров системы. Дана

оценка погрешности метода Монте-Карло. В главе дано описание модели Френкеля-Конторовой, которая применялась для моделирования влияния подложки на свойства 1D и 2D-магнетиков.

**Вторая глава** посвящена исследованию поведения дипольной подсистемы в одномерном мультиферроике на подложке. При Монте-Карло моделировании была использована модель Изинга для цепочки спинов с конкурирующими взаимодействиями ближайших и следующих соседей (1D ANNNI модель). Дано описание модельного квазиодномерного мультиферроика  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ , а также краткий обзор литературы по исследованию данного вещества и соединений на его основе. Было подтверждено предположение о том, что сегнетоэлектричество в кристалле  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  обусловлено формированием спиновой структуры  $\uparrow\downarrow$ .

Было показано влияние периодического потенциала подложки на максимальные значения поляризации и температуру фазового перехода. Были получены температурные зависимости намагниченности, поляризации во внешнем магнитном поле без потенциала подложки и с его присутствием.

Во **третьей главе** исследовано поведение 2D ФМ плёнки на СЭ подложке с периодической структурой под влиянием электрического поля. Моделирование поведения плёнки проведено с помощью метода Монте-Карло и кластерного алгоритма Вольфа. Влияние СЭ подложки на ФМ плёнку моделировалось введением периодического потенциала Френкеля-Конторовой. Внешнее электрическое поле приводит к деформации СЭ подложки, что в свою очередь приводит к изменению периода потенциала подложки. Моделирование показало, что деформация подложки приводит к уменьшению температуры фазового перехода в ФМ плёнке. Кроме того, получен вид зависимости намагниченности от внешнего электрического поля при небольших деформациях подложки с помощью теории среднего поля.

В **четвёртой главе** исследовано влияние подложки на температуру магнитного фазового перехода в 2D-магнетике. Магнетик был представлен в виде модели Изинга с квадратной решёткой, влияние подложки моделировалось при помощи двумерного периодического потенциала Френкеля-Конторовой.

Получено выражения для смещения температуры фазового перехода для модели Изинга в линейном приближении. Для коэффициента покрытия не равному 1 был проведен компьютерный эксперимент. Получена зависимость температуры Кюри и критических индексов от периода потенциала подложки для различной амплитуды потенциала. Если период потенциала подложки отли-

чается от межатомного расстояния в 2D-магнетике более чем на 5%, происходит существенное изменение намагниченности и критических индексов магнетика из-за перестройки кристаллической структуры.

В пятой главе приведено исследование влияния температуры, внешнего магнитного поля и периодического ФК-потенциала на 2D-магнетик со скирмионной структурой. В ходе исследования была использована трехмерная модель Гейзенберга на квадратной решётке. Скирмионная структура обеспечивалась наличием взаимодействия Дзялошинского-Мория и анизотропии в энергии системы. Варьируя параметры анизотропии и внешнего магнитного поля были выявлены 3 скирмионные фазы. Показано, что разрушение скирмионной структуры в каждой из этих фаз происходит при различных значениях температуры.

Введение в энергию системы периодического потенциала, моделирующего влияние подложки на магнетик, оказало влияние на процесс формирования магнитного порядка в определенном температурном диапазоне.

В заключении представлены основные результаты, полученные в диссертационной работе.

## Глава 1. Моделирование критических явлений в магнетиках

### 1.1 Численный эксперимент методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло (МК) – общее название группы численных методов решения математических задач при помощи моделирования случайных величин и статистической оценки их характеристик [87], которые в свою очередь должны совпадать с аналогичными величинами решаемой задачи [88]. Отсюда и произошло название метода, т.к. город Монте-Карло известен своим казино, ибо одним из простейших приборов для генерации случайных чисел служит рулетка.

Поскольку существующие теории [89] не могут адекватно описать фазовые переходы в реальных системах и вблизи точки перехода не работают, а точные решения получены для очень ограниченного числа моделей, описывающих фазовый переход второго рода [90], большинство результатов исследований в области теории фазовых переходов и критических явлений были получены на основе численных методов.

Большую популярность среди численных методов в настоящее время приобрели методы Монте-Карло. Появление метода Монте-Карло обусловлено опубликованием статьи Метрополиса и Улама «Метод Монте-Карло» [91] в 1949г. Широкое применение этот метод получил после того, как Метрополис и другие [92] применили его к каноническому ансамблю для расчета состояния двумерной модели – системы твёрдых дисков. Вуд и другие распространили этот метод на трёхмерные системы с гладким межчастичным потенциалом Леннарда-Джонса [93]. Сегодня различные вариации МК метода применяются для решения самых разных задач в химии, биологии, физики, социологии, экономики и т.д.

#### 1.1.1 Классический метод Монте-Карло

Типичное применение метода МК в статистической физике заключается в вычислении средних значений макроскопических величин для систем, га-

мильтониан которых предполагается известным. Погрешность вычислений, как правило, пропорциональна  $N^{-1/2}$ , где  $N$  – число МК испытаний, которое контролируется в рамках самого метода.

В методе МК исследуемая система совершает случайные блуждания по конфигурационному пространству. Любая равновесная термодинамическая характеристика системы может быть получена путем усреднения по каноническому конфигурационному ансамблю. А последовательность различных конфигураций, получаемых в ходе реализации метода, можно рассматривать как временную эволюцию системы. В общем случае, применение методов МК к ансамблю, находящемуся в произвольном состоянии, приводит к релаксации ансамбля в состояние термодинамического равновесия. Такая динамическая интерпретация процесса очень важна для исследования времени релаксации систем и параметров, зависящих от времени. Далее рассмотрим стандартный метод МК для канонического ансамбля при исследовании критических явлений. При изложении использованы работы [88; 92; 93].

Рассмотрим систему из  $N$  частиц, находящуюся в объеме  $V$  при постоянной температуре  $T$ . Каждая частица описывается множеством динамических переменных  $\{a_i\}$ , где  $i$  – индекс частицы. Обозначим через  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\{a_i\})$  точку фазового пространства или конфигурацию системы. Взаимодействие между частицами описывается гамильтонианом  $H(\mathbf{x})$ . Тогда термодинамическое усреднение любой наблюдаемой величины  $A(\mathbf{x})$  определяется как:

$$\langle A(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) e^{-\frac{H(\mathbf{x})}{k_B T}}, \quad (1.1)$$

$$Z = \int d\mathbf{x} e^{-\frac{H(\mathbf{x})}{k_B T}}$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана. Интеграл берется по всему фазовому пространству. Если множество  $\{a_i\}$  принимает дискретные значения, то среднее  $A(\mathbf{x})$  можно представить как:

$$\langle A(\mathbf{x}) \rangle = \frac{\sum_n A(\mathbf{x}_n) e^{-\frac{H(\mathbf{x}_n)}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{H(\mathbf{x}_n)}{k_B T}}} \quad (1.2)$$

При вычислении интеграла (1.1) в многомерном случае можно применить метод простой выборки, случайным образом выбирая точки  $\mathbf{x}_n$  фазового пространства. Однако подынтегральное выражение  $e^{-\frac{H(\mathbf{x}_n)}{k_B T}}$  может изменяться на

несколько порядков и многие конфигурации оказываются маловероятными и вносят малый вклад. Использование метода существенной выборки приводит к уменьшению статистической погрешности без увеличения числа конфигураций [94]. Этот метод, предложенный Метрополисом и др., предполагает выбор состояний  $\mathbf{x}_n$  согласно некоторой плотности вероятности  $P(\mathbf{x}_n)$ . Тогда термодинамическое усреднение величины  $\bar{A}$ :

$$\bar{A(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=1}^M A(\mathbf{x}_i) / P(\mathbf{x}_i) e^{-\frac{H(\mathbf{x}_i)}{k_B T}}}{\sum_{i=1}^M e^{-\frac{H(\mathbf{x}_i)}{k_B T}} / P(\mathbf{x}_i)} \quad (1.3)$$

где  $M$  – общее число состояний, выработанных в МК процессе. Самым простым и наиболее естественным выбором  $P(\mathbf{x}_n)$  служит зависимость  $P(\mathbf{x}_n) = P_{eq}(\mathbf{x}_n) \sim e^{-\frac{H(\mathbf{x}_i)}{k_B T}}$ , тогда больцмановский множитель сокращается и (1.3) сводится к простому арифметическому усреднению:

$$\bar{A(\mathbf{x})} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(\mathbf{x}_i) \quad (1.4)$$

Но в реальных случаях нам не известно точное выражение для равновесной функции распределения  $P(\mathbf{x}_n)$ . Однако можно организовать случайное блуждание  $\mathbf{x}_v$  в фазовом пространстве с помощью марковского процесса так, чтобы  $P(\mathbf{x}_v)$  сходилась к  $P_{eq}(\mathbf{x}_v)$ . Каждое состояние  $\mathbf{x}_{v'}$  конструируется из предыдущего  $\mathbf{x}_v$  с помощью соответствующей вероятности перехода  $W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'})$ . Вероятность перехода  $W$  можно выбрать такой, что при  $M \rightarrow \infty$  функция распределения состояний стремится к равновесному распределению:

$$P_{eq}(\mathbf{x}_v) = \frac{e^{-\frac{H(\mathbf{x}_v)}{k_B T}}}{\sum_v e^{-\frac{H(\mathbf{x}_v)}{k_B T}}} \quad (1.5)$$

Достаточным условием для достижения этого распределения является выполнения принципа детального равновесия:

$$P_{eq}(\mathbf{x}_v) W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}) = P_{eq}(\mathbf{x}_{v'}) W(\mathbf{x}_{v'} \rightarrow \mathbf{x}_v) \quad (1.6)$$

Уравнение (1.6) означает, что отношение вероятностей прямого ( $\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}$ ) и обратного ( $\mathbf{x}_{v'} \rightarrow \mathbf{x}_v$ ) переходов зависит только от разности энергий этих состояний  $\delta H = H(\mathbf{x}_{v'}) - H(\mathbf{x}_v)$ :

$$\frac{W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'})}{W(\mathbf{x}_{v'} \rightarrow \mathbf{x}_v)} = e^{-\frac{\delta H}{k_B T}} \quad (1.7)$$

На практике, в качестве функции  $W$ , чаще всего используют 2 функции:

$$W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}) = \begin{cases} \frac{1}{\zeta} e^{-\frac{\delta H}{k_B T}}, & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\zeta}, & \delta H \leq 0 \end{cases}, \quad (1.8)$$

или в виде функции Глаубера:

$$W(\mathbf{x}_v \rightarrow \mathbf{x}_{v'}) = \frac{1}{2\zeta} \left( 1 - th \left( \frac{\delta H}{2k_B T} \right) \right) = \frac{1}{\zeta} \frac{e^{-\frac{\delta H}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\delta H}{k_B T}}}, \quad (1.9)$$

где  $\zeta$  – произвольный параметр, который может быть выбран, например, равным единице.  $\zeta$  также можно выбрать в качестве «временного МК-шага», тогда  $W$  будет играть роль вероятности перехода в единицу времени. При реализации метода МК выбор последовательных конфигураций  $v$  и  $v'$  сильно зависит от используемой модели. Для моделей с дискретными степенями свободы переход в новую конфигурацию означает выбор одного из возможных состояний для одной из переменных.

Далее рассмотрим применение метода МК для исследования наиболее популярных классических моделей Изинга, ХУ и Гейзенберга.

### 1.1.2 Модель Изинга

Модель Изинга является наиболее простой и универсальной моделью магнетиков при изучении критических явлений в решеточных системах. Несмотря на это, до сих пор точные решения имеют только одномерные и двумерные случаи [90]. В модели Изинга спины расположены на  $d$ -мерной решетке. Значения спинов могут принимать лишь 2 значения: 1 или -1, которые соответствуют двум возможным ориентациям спинов. Гамильтониан модели Изинга при наличии внешнего магнитного поля выглядит следующим образом:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (1.10)$$

где  $S_i = \pm 1$ ,  $J$  – параметр обменного взаимодействия между спинами (при  $J > 0$  взаимодействие носит ферромагнитный характер, при  $J < 0$  – антиферромагнитный),  $h$  – внешнее магнитное поле в единицах магнетона Бора  $\mu_B$ .  $\langle i,j \rangle$  означает, что сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов.

Последовательность конфигураций  $v$  и  $v'$  осуществляется путём переворота отдельных спинов ( $S_{i'} = -S_i$ ). Выбор спина для переворота осуществляется последовательно, либо случайным образом. Один шаг Монте-Карло означает, что выполнялась попытка перевернуть каждый из спинов в системе. Если при перевороте спина разность энергий нового состояния и старого  $\delta H \leq 0$ , необходимо принять вероятность перехода равным единице, т.е.  $W(S_i \rightarrow S_{i'}) = 1$ . Однако нужно разрешить также переходы с положительной разностью энергий  $\delta H > 0$ . Таким образом, вероятность переворота спина выбираем равной (1.8) или (1.9).

Модель Изинга может быть легко усовершенствована путём учета взаимодействия между следующими за ближайшими спинами [95; 96], анизотропии и т.д.

### 1.1.3 XY-модель

Трёхмерная классическая XY-модель описывает широкий класс сильно анизотропных магнитных систем (с анизотропией типа «легкая плоскость»), а также сверхтекучесть гелия  $He^4$  и высокотемпературные проводники [94]. Гамильтониан трёхмерной XY-модели выглядит так:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - h \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (1.11)$$

где  $\mathbf{S}_i$  – плоский единичный вектор в узле  $i$ . Как и в модели Изинга,  $\langle i,j \rangle$  означает, что сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов,  $J$  – параметр обменного взаимодействия между спинами.

XY-модель является частным случаем общих решеточных моделей с  $n$ -компонентным параметром порядка, где  $n = 2$ , и является одной из простейших моделей с непрерывной симметрией. Трёхмерная XY-модель при  $J > 0$  описывает фазовый переход второго рода в ферромагнитное состояние ниже  $T_C$  – температуры Кюри. При рассмотрении двумерной XY-модели задается плоская решетка, содержащая  $N = L^2$  узлов. При переходе к угловым переменным

гамильтониан принимает вид:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \cos(\phi_i - \phi_j) - h \sum_i^N \cos \phi_i, \quad (1.12)$$

где  $\phi_i$  – фаза  $i$ -го спина, которая отсчитывается от произвольной вертикальной оси в плоскости решетки против часовой стрелки.

В моделях с непрерывной симметрией, таких как XY-модель или классическая модель Гейзенберга, конфигурационное пространство  $\phi_v$  представляет собой совокупность ориентаций единичных векторов. Поэтому последовательность конфигураций  $v$  и  $v'$  осуществляется путём выбора нового направления вектора:  $\phi = 2\pi\xi$ , где  $\xi$  – случайное число, равномерно распределенное в интервале  $(0, 1)$ . Однако часто целесообразно новое направление вектора выбирать не полностью случайным образом, а в интервале вблизи предыдущего значения:

$$\phi_{v'} = \phi_v + \Delta\phi(2\xi - 1),$$

$\Delta\phi$  выбирается так, чтобы средняя скорость перехода была оптимальной.

В случае, когда необходимо выбирать точки в фазовом пространстве в соответствии с определенной закономерностью  $V(\phi_v)$ , конструируется алгоритм, который генерирует  $\phi_{v'}$  пропорционально распределению вероятности  $P(\phi_v) \sim e^{\frac{V(\phi_v)}{k_B T}}$ .

#### 1.1.4 Модель Гейзенберга

Модель Гейзенберга одна из наиболее изучаемых моделей статистической физики. В течение многих лет эта модель в различных размерностях интенсивно исследуется, используя различные методы, в том числе и методы Монте-Карло.

Гамильтониан модели Гейзенберга с взаимодействием между ближайшими соседями можно представить в виде [97]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z, \quad (1.13)$$

где  $J$  – параметр обменного взаимодействия между спинами,  $\mathbf{S}_i$  – трёхкомпонентный единичный вектор  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  в узле  $i$ .

При переходе к угловым переменным последовательность конфигураций  $v$  и  $v'$  осуществляется путём выбора нового направления вектора:

$$\cos \theta = 2\xi_1 - 1, \quad \phi = 2\pi\xi_2,$$

где  $0 \leq \theta < \pi$ ,  $0 \leq \phi < 2\pi$ ,  $\theta$  и  $\phi$  – угловые компоненты вектора  $\mathbf{S}_i$ ,  $\xi_1$  и  $\xi_2$  – случайные числа, равномерно распределенное в интервале  $(0, 1)$ .

Для модели Гейзенберга один МК-шаг Марковкой цепи заключается в попытке переворота закрепленного в узле решетки спина на произвольный угол.

## 1.2 Изучение критических явлений методом Монте-Карло

Для описания поведения термодинамических характеристик вблизи точки фазового перехода вводятся критические индексы. Предполагается, что поведение термодинамических параметров вблизи  $T_C$  имеет степенной вид с дробными показателями [90]. Определяя критический индекс для теплоёмкости обычно утверждают, что вблизи  $T_C$  теплоёмкость при  $h = 0$  расходится, таким образом:

$$\begin{aligned} C(0, T) &\sim t^{-\alpha}, & t \rightarrow 0^+, \\ C(0, T) &\sim (-t)^{-\alpha'}, & t \rightarrow 0^-, \end{aligned} \quad (1.14)$$

где  $t = (T - T_C)/T_C$ .

Критический индекс корреляционной длины обозначается как  $\nu$ . Корреляционная длина  $\xi$  является функцией  $h$  и  $T$ , и предполагается, что она стремится к бесконечности при приближении к  $T_C$ .

$$\begin{aligned} \xi(0, T) &\sim t^{-\nu}, & t \rightarrow 0^+, \\ \xi(0, T) &\sim (-t)^{-\nu'}, & t \rightarrow 0^-, \end{aligned} \quad (1.15)$$

Критические индексы для спонтанной намагниченности, намагниченности и восприимчивости обозначаются как  $\beta$ ,  $\delta$  и  $\gamma$ , соответственно. Выражения для них:

$$\begin{aligned} m_0(T) &\sim t^{-\beta}, & t \rightarrow 0^-, \\ m(h, T_C) &\sim h^{1/\delta}, & h \rightarrow 0 \\ \chi(0, T) &\sim t^{-\gamma}, & t \rightarrow 0^+, \\ \chi(0, T) &\sim (-t)^{-\gamma'}, & t \rightarrow 0^-, \end{aligned} \quad (1.16)$$

Совокупный набор критических индексов связан с понятием класса универсальности критического поведения различных систем. Системы принадлежат к одному классу универсальности, если они имеют совпадающие в пределах погрешности наборы критических индексов. В этом случае они демонстрируют одинаковое критическое поведение вблизи точки фазового перехода.

### 1.2.1 Теория конечно-размерного масштабирования

При изучении фазовых переходов в магнитных системах предполагается рассмотрение систем бесконечных размеров. Однако при практическом Монте-Карло моделировании приходится иметь дело с решётками конечных размеров. А для имитации бесконечных размеров вводят периодические граничные условия (ГУ), при которых следующими элементами за последними считаются первые в исследуемой решётке. В этой связи возникают так называемые «эффекты конечных размеров системы», говорящие об отличии результатов, полученных для решёток разных размеров. Основоположниками теории конечно-размерного скейлинга (гипотеза подобия) стали Фердинанд, Фишер, Барбер и Биндер [98—103]. Согласно этой теории, для системы достаточно больших размеров  $L$  с периодическими граничными условиями свободную энергию при температуре  $T$ , близкой к критической  $T_C$  (для бесконечной системы), можно записать как:

$$F(L, T) = L^{-d} F_0(L^{1/\nu} t), \quad (1.17)$$

где  $d$  – размерность системы,  $\nu$  – критический индекс бесконечной системы.

Скейлинговое выражение для параметра порядка, восприимчивости и теплоемкости запишутся как [104; 105]:

$$m = L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (1.18)$$

$$\chi T = L^{-\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (1.19)$$

$$C = L^{-\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (1.20)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  – критические индексы для системы бесконечных размеров.

Смещение критической температуры конечной системы  $T_C(L)$ , которая обычно определяется по пику теплоёмкости, будет зависеть от  $L$  как:

$$\delta T_C = [1 - T_C(L)/T_C(\infty)] \approx \alpha L^{-1/\nu}. \quad (1.21)$$

Гипотеза подобия предсказывает следующую связь критических индексов [89]:

$$\gamma = \gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (1.22)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma' = 2, \quad (1.23)$$

$$\nu = \nu', (2 - \eta)\nu = \gamma, \quad (1.24)$$

$$d\nu = 2 - \alpha, \quad (1.25)$$

Последнее соотношение включает размерность  $d$  и имеет название «гиперскейлинговое» соотношение. Оно справедливо при  $d \leq 4$ , при  $d > 4$  требуется несколько измененное соотношение [106; 107]. Если мы знаем два независимых индекса, то остальные мы можем получить из этой системы уравнений.

Соотношения, полученные в рамках гипотезы подобия, находят подтверждения при рассмотрении точно решаемых моделей [90]. Справедливость теории конечно-размерного скейлинга также подтверждена в работах по численному МК моделированию 2D и 3D моделей Изинга [104; 105; 108; 109].

Для определения температуры фазового перехода  $T_C$  в реальном компьютерном эксперименте с системами конечных размеров зачастую используют метод кумулянтов Биндера. Данный метод заключается в вычислении кумулянтов четвертого порядка для различных размеров  $L$  [101]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle s^4 \rangle_L}{\langle s^2 \rangle_L^2}, \quad (1.26)$$

где в качестве параметра порядка  $s$  берется намагниченность  $m$ . При достаточно больших размерах системы ( $L \gg \xi$ ) для  $T > T_C$   $U_L$  стремится к нулю как  $U_L \propto L^{-d}$ , а для  $T < T_C$   $U_L$  стремится к  $U_\infty = 2/3$ . После построения зависимостей  $U_L(T)$  для разных  $L$  температуру  $T_C$  получают из общей точки пересечения кривых  $U_L$ .

Следует отметить, что если для кумулянта Биндера вместо параметра порядка  $s$  подставить внутреннюю энергию  $E$  получится величина  $V_L$ :

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{\langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (1.27)$$

которая имеет минимальное значение при  $T_C(L)$  в случае фазового перехода первого рода [110; 111]. В то время как для фазового перехода второго рода данная величина будет стремиться к значению  $2/3$  при  $L \rightarrow \infty$  даже при  $T_C$ .

### 1.2.2 Погрешность метода Монте-Карло

Надежность результатов, получаемых методом Монте-Карло, зависит от точности самого метода и от того, насколько исследуемая модель соответствует реальной системе: правильно ли описано взаимодействие частиц друг с другом, влияние внешних потенциалов и т.д. При анализе точности метода Монте-Карло следует различать статистическую погрешность, обусловленную конечностью числа испытаний, и систематическую погрешность, обусловленную конечностью числа частиц в моделируемой системе, качеством генератора случайных чисел, периодическими граничными условиями и приближениями при подсчете термодинамических характеристик системы [112].

Систематическая погрешность метода Монте-Карло обусловлена не малым числом частиц, а тем, что при конкретной реализации из-за периодических граничных условий подавляется некоторая часть флуктуаций, возможных в реальной системе, а также вносятся нефизические корреляции на больших расстояниях. Поэтому при анализе погрешности реализации следует учитывать следующие факторы [112]:

1. в каноническом ансамбле число частиц фиксируется и исключается возможность флуктуации частиц в объеме. Можно показать, что погрешность в вычислении термодинамических величин, связанная с фиксацией числа частиц  $N$  имеет порядок  $\ln N/N$
2. при подсчёте энергии взаимодействия методом ближайшего образа не учитываются взаимодействия на расстояниях, больших  $\pm L$  по каждой оси
3. периодические ГУ вносят в систему нефизические корреляции на больших расстояниях

Использование теории конечно-размерного скейлинга вблизи  $T_C$  (когда радиус корреляции становится сравнимым с линейными размерами системы)

существенно уменьшает систематические ошибки, связанные с конечностью размеров исследуемых систем.

Невозможность достичь бесконечно большого количества испытаний, или другими словами – бесконечно времени наблюдения, является одним из основных ограничений для применения методов Монте-Карло. Здесь решающее значение играет оценка статистических ошибок наблюдаемых величин.

Предположим, мы провели  $M$  ( $M \gg 1$ ) последовательных наблюдений величины  $A$ . Предположим также, что эти испытания были статистически независимы. Статистическая погрешность  $\delta A$  для величины  $\bar{A}$  из формулы (1.4) может быть представлена в виде [113]:

$$\overline{\delta A^2} = \frac{[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]}{M} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{(A(\mathbf{x}_i) - \langle A \rangle)^2}{M} \quad (1.28)$$

Среднеквадратичная статистическая погрешность будет равна (переобозначим  $A(x_i) \equiv A_i$ ) [114]:

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \left\langle \left[ \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (A_i - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{M^2} \sum_{i=1}^M \langle (A_i - \langle A \rangle)^2 \rangle + \frac{2}{M^2} \sum_{i_1=1}^M \sum_{i_2=i_1+1}^M (\langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle - \langle A \rangle^2) \end{aligned} \quad (1.29)$$

Заменяем индекс суммирования  $i_2$  на  $i_2 + i$  получим:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \left\{ 1 + 2 \sum_{i=1}^M \left( 1 - \frac{i}{M} \right) \phi_A^{(i)} \right\}, \quad (1.30)$$

где  $\phi_A^{(i)}$  – это автокорреляционная функция

$$\phi_A^{(i)} = \frac{\langle A_{i_1} A_{i_1+i} \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.31)$$

Этот вывод можно связать с временем  $t_i = \delta t \sim i$ , где  $\delta t$  есть временной интервал между двух Монте-Карло наблюдений  $A_i$  и  $A_{i+1}$ . Логично взять  $\delta t = 1/N$ , т.е. время одного МК шага (при каждой попытке перевернуть один спин согласно алгоритму Метрополиса), однако при больших  $N$  последовательные конфигурации будут сильно коррелировать друг с другом, т.к. будут отличаться лишь ориентацией одного спина. Таким образом, разумнее выбрать

$\delta t = 1$  в соответствии с «временем» одного МК шага на спин. Более того, возле критической температуры  $T_C$  более эффективным будет уменьшение числа наблюдений, к примеру  $\delta t = 10$  [115]. Выполнив замену  $\phi_A^{(i)}$  на  $\phi_A(t)$ , а также отметив инвариантность относительно начала временного отсчета, получим

$$\phi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) - \langle A \rangle^2 \rangle}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.32)$$

Теперь перейдем от дискретного  $t$  к непрерывному, т.е. заменим суммирование в формуле (1.30) на интегрирование и введем время наблюдения  $\tau_M = M\delta t$ ,

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \left\{ 1 + 2 \int_0^{\tau_M} \frac{dt}{\delta t} \left( 1 - \frac{t}{\tau_M} \right) \phi_A(t) \right\}, \quad (1.33)$$

Определим время корреляции как

$$\tau_A = \int_0^{\infty} \phi_A(t) dt \quad (1.34)$$

и принимая, что  $\tau_M \gg \tau_A$  перепишем выражение (1.33)

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \left( 1 + 2 \frac{\tau_A}{\delta t} \right). \quad (1.35)$$

Если  $\tau_A$  расходится возле критической точки, а  $\delta t$  остается порядка единицы, то  $\tau_A/\delta t \gg 1$  и последняя формула будет иметь вид:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = 2 \frac{\tau_A}{\tau_M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]. \quad (1.36)$$

Полученное выражение говорит о том, что статистическая погрешность не зависит от выбора временного интервала  $\delta t$ , а зависит только от количества статистически независимых наблюдений  $n = \tau_M/(2\tau_A)$ . Несмотря на то, что для данного  $\tau_M$  выбор малого значения  $\delta t$  приведет к увеличению числа наблюдений, это не приведет к уменьшению статистической погрешности. Важно лишь отношение времени релаксации  $\tau_M$  и времени наблюдения  $\tau_A$ .

Ещё одним важным аспектом при оценке статистической погрешности является вопрос о том, как они связаны с размером исследуемой системы [115]. Если мы запишем выражения для внутренней энергии и намагниченности, мы

увидим, что среднеквадратичная статистическая ошибка будет обратно пропорциональна размеру системы  $N = L^d$ ,

$$\langle(\delta E)^2\rangle = 2\frac{\tau_E}{\tau_M}\frac{k_B T^2 C}{L^d}, \quad \langle(\delta m)^2\rangle = 2\frac{\tau_m}{\tau_M}[\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2] = 2\frac{\tau_m}{\tau_M}\frac{k_B T^2 \chi}{L^d}. \quad (1.37)$$

Соотношение, при котором среднеквадратичная погрешность обратно пропорциональна размеру системы называется «сильным самоусреднением» и оно справедливо вдали от  $T_C$ , вблизи  $T_C$  оно заменяется на «слабое самоусреднение». Поскольку возле  $T_C$  для конечноразмерной системы  $\chi$  и  $C$  масштабируются по степеням  $L$  (для  $d \leq 4$   $\chi(T = T_C) \propto L^{\gamma/\nu}$ ,  $C(T = T_C) \propto L^{\alpha/\nu}$ ), получаем

$$\langle(\delta m)^2\rangle \propto \frac{1}{n}L^{\gamma-d}, \quad \langle(\delta E)^2\rangle \propto \frac{1}{n}L^{\alpha-d}, \quad T = T_C. \quad (1.38)$$

Однако, ситуация меняется если мы будем рассматривать погрешность величин, полученных из флуктуационных соотношений, таких как сами  $\chi$  и  $C$ . Теперь в выражении (1.36) величина  $A$  заменяется на  $L^d(\delta m)^2$  или  $L^d(\delta E)^2$  соответственно, где  $\delta m = m - \langle m\rangle$  и  $\delta E = E - \langle E\rangle$ . Отсюда

$$(k_B T \Delta \chi)^2 = \frac{1}{n}L^{2d}[\langle(\delta m)^4\rangle - \langle(\delta m)^2\rangle^2], \quad (k_B T \Delta C)^2 = \frac{1}{n}L^{2d}[\langle(\delta E)^4\rangle - \langle(\delta E)^2\rangle^2]. \quad (1.39)$$

Учитывая, что вдали от  $T_C$  и  $\delta m$  и  $\delta E$  имеют нормальное распределение при больших  $L$ , с помощью выражений  $\langle(\delta m)^4\rangle = 3\langle(\delta m)^2\rangle^2$ ,  $\langle(\delta E)^4\rangle = 3\langle(\delta E)^2\rangle^2$  можем получить

$$\sqrt{(k_B T \Delta \chi)^2} = \sqrt{\frac{2}{n}L^d\langle(\delta m)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n}k_B T \chi}, \quad \text{т.е. } \sqrt{(\Delta \chi)^2}/\chi = \sqrt{2/n}. \quad (1.40)$$

$$\sqrt{(k_B T \Delta C)^2} = \sqrt{\frac{2}{n}L^d\langle(\delta E)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n}k_B T C}, \quad \text{т.е. } \sqrt{(\Delta C)^2}/C = \sqrt{2/n}. \quad (1.41)$$

Отсюда мы видим, что относительная погрешность для величин, полученных из флуктуационных соотношений не уменьшается полностью с увеличением  $L$ , она выходит незначительной только когда число независимых состояний  $n$  становится большим. Такое соотношение называется «плохим самоусреднением» [115].

### 1.2.3 Критическое замедление алгоритма Метрополиса

Как отмечалось выше, при увеличении размера исследуемой системы, последовательные состояния конфигурации системы сильно коррелируют между собой, что заставляет увеличивать время между последовательными наблюдениями, участвующими в усреднении термодинамических величин. Время релаксации вблизи критической точки расходится по степенному закону:

$$\tau \propto \left| 1 - \frac{T}{T_C} \right|^{-\nu z} \quad (1.42)$$

Такое поведение называют «критическим замедлением». Время релаксации также демонстрирует эффекты конечных размеров системы и в случае, когда размеры системы сравнимы с длиной корреляции, начинается процесс округления, и максимальное время релаксации [88]:

$$\tau_{max} \propto L^z, \quad T = T_C \quad (1.43)$$

Для алгоритма Метрополиса динамический критический показатель  $z \approx 2$  и почти не зависит от размерности задачи. Для двумерной модели Изинга  $\nu = 1$  и расходимость времени релаксации имеет квадратичный характер [116] Это сильно снижает эффективность алгоритма Метрополиса вблизи критической точки, т.к. требует значительного увеличения вычислительных мощностей.

Для преодоления проблемы критического замедления предложен ряд алгоритмов. Среди них многосеточные алгоритмы (multigrid Monte Carlo) [117–122] оверрелаксационные (overrelaxation) алгоритмы [123–126], алгоритмы, использующие метод ренорм-групп [127–130] кластерные алгоритмы [131–134], репликальные алгоритмы (Replica Monte Carlo Method) [135; 136].

### 1.2.4 Кластерные алгоритмы Монте-Карло

Главным отличием кластерных алгоритмов от стандартного алгоритма Метрополиса заключается в том, что в ходе моделирования переворачиваются не отдельные спины, а целые кластеры однонаправленных соседних спинов.

Таким образом, внутри кластера конфигурация спинов сохраняется и изменения энергии происходит только по периметру кластера. Это приводит к тому, что последовательные конфигурации находятся намного дальше друг от друга в конфигурационном пространстве, чем при стандартном алгоритме Метрополиса. Тем самым обеспечивается меньшая корреляция последовательных состояний.

Основанием при рассмотрении кластерного алгоритма является функция распределения в представлении Фортуина-Кастелеяна [137]:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left( K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \right) = \sum_{\{S_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{K[(1-p) + p\delta_{S_i S_j}]} \quad (1.44)$$

или, если учесть что  $S_i S_j$  может принимать значения 1 либо -1, получаем:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{n_{ij}\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{K[(1-p)\delta_{n_{ij},0} + p\delta_{S_i S_j} \delta_{n_{ij},1}]}, \quad (1.45)$$

где  $K = J/k_B T$ ,  $n_{ij}$ -коэффициенты связи, которые принимают значения либо 0 либо 1. Если 2 спина  $S_i$  и  $S_j$  однонаправленные, связь  $n_{ij}$  «активна» ( $n_{ij} = 1$ ) с вероятностью

$$p = 1 - e^{-2K}, \quad (1.46)$$

в другом случае  $n_{ij} = 0$ . Алгоритм Свендсена-Янга [131] использует функцию распределения (1.45) для спинов и коэффициентов связи. «Переворот кластеров» состоит в обновлении коэффициентов связи  $n_{ij}$  для данной конфигурации спинов  $S_i$  и обновлении спинов  $S_i$  для данной конфигурации связей. Таким образом, этот алгоритм можно разделить на несколько шагов:

1. если соседние спины имеют одинаковое значение между ними образуется связь с вероятностью  $p$  (1.46), то есть если  $S_i \neq S_j$ ,  $n_{ij} = 0$ , если  $S_i = S_j$ ,  $n_{ij} = 1$  с вероятностью  $p$  и  $n_{ij} = 0$  с вероятностью  $1 - p$ .
2. выбираются кластеры, образованные «активными» связями ( $n_{ij} = 1$ ).
3. каждому кластеру (включая и одиночные спины) присваивается новое значение в случайном порядке (1 или -1).

Недостатком алгоритма Свендсена-Янга является то, что много времени тратится на поиск и обработку небольших кластеров, которые играют наименьшую роль с точки зрения физических процессов (таких как увеличение длины

корреляции возле критической точки). С этой точки зрения более эффективно будет рассматривать один кластер за шаг, а не проводить разложение всей решетки на кластеры.

Алгоритм Вольфа [132] является однокластерным алгоритмом, в котором кластер «образуется» вокруг случайно выбранного спина. Образование связей  $n_{ij}$  вокруг выбранного спина и переворот кластера происходит аналогично алгоритму Свендсена-Янга. Если средний размер кластера обозначить как  $\langle c \rangle$ , то «просмотр» всей решётки будет выполнен за  $L^d/\langle c \rangle$  шагов для одиночного кластера, в то время как «просмотр» всей решётки в стандартном алгоритме Метрополиса составляет  $L^d$  шагов. Если такое определение «просмотра» решётки принять за шаг Монте Карло, то сравнение критического индекса  $z$  (1.43) для разных алгоритмов и разных величин будет выглядеть, как приведено в таблице 1 [115].

Таблица 1 — Сравнение критического индекса  $z$  времени релаксации для различных алгоритмов величин и размерности  $d = 2$  и  $d = 3$ .

| Алгоритм       | $d = 2$ | $d = 3$ | Величина  | Источник  |
|----------------|---------|---------|-----------|-----------|
| Метрополис     | 2.16    | 2.03    | $E$ и $m$ | [138—140] |
| Свендсена-Янга | 0.27    | 0.50    | $E$       | [141]     |
|                | 0.20    | 0.50    | $\chi$    | [141]     |
| Вольфа         | 0.26    | 0.28    | $E$       | [141]     |
|                | 0.13    | 0.14    | $\chi$    | [141]     |

### 1.3 Модель Френкеля-Конторовой

Модель Френкеля-Конторовой [55; 56] описывает цепочку классических взаимодействующих между собой частиц в присутствии внешнего периодического потенциала. Такая цепочка представлена на рисунке 1.1. Впервые эта модель была предложена в 1938 году для описания динамики кристаллической решетки возле ядра дислокации. Эта модель с самого своего появления пользуется большой популярностью у исследователей, работающих в области физики твердого тела и нелинейной динамики, так как является относительно простой и универсальной [142].

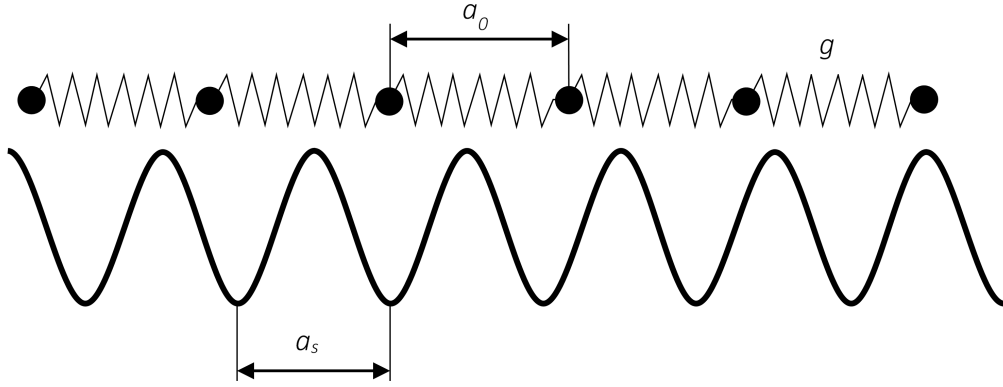


Рисунок 1.1 — Схематическое представление модели Френкеля-Конторовой в виде цепочки частиц, связанных гармоническими пружинами жёсткости  $g$  и взаимодействующие с внешним периодическим потенциалом с периодом  $a_s$ . Равновесное межатомное расстояние равно  $a_0$ .

Запишем Гамильтониан механической модели, изображенной на рисунке 1.1.

$$H = K + U, \quad (1.47)$$

где  $K$  – кинетическая энергия,  $U$  – потенциальная. Кинетическая энергия записывается как:

$$K = \frac{m_a}{2} \sum_n \left( \frac{dx_n}{dt} \right)^2, \quad (1.48)$$

где  $m_a$  – масса частицы,  $x_n$  – координата  $n$ -той частицы. Потенциальная энергия  $U$  состоит из двух частей:

$$U = U_{sub} + U_{int}. \quad (1.49)$$

$U_{sub}$  – энергия взаимодействия с внешним периодическим потенциалом, которая записывается как:

$$U_{sub} = \frac{\varepsilon_s}{2} \sum_n \left[ 1 - \cos \left( \frac{2\pi x_n}{a_s} \right) \right], \quad (1.50)$$

где  $\varepsilon_s$  – амплитуда,  $a_s$  – период потенциала.

Энергия  $U_{int}$  отвечает за взаимодействие между ближайшими соседями по цепочке.

$$U_{int} = \frac{g}{2} \sum_n (x_{n+1} - x_n - a_0)^2, \quad (1.51)$$

где  $g$  – коэффициент жесткости,  $a_0$  – равновесное межатомное расстояние в отсутствии внешнего потенциала.

Данная модель накладывает несколько ограничений для физической системы:

1. Частицы цепи двигаются только в одном направлении;
2. В общем выражении для внешнего потенциала энергия записывается как

$$U_{sub} = \sum_n V_{sub}(x_n),$$

где вместо периодической функции  $V_{sub}(x)$  берется только первый член от разложения Фурье;

3. Учитываются взаимодействия только между парами ближайший друг к другу частиц:

$$U_{int} = \sum_n V_{int}(x_{n+1} - x_n),$$

а для потенциала  $V_{int}(x)$  учитывается только гармонический член разложения в ряд Тейлора.

Переходя к безразмерной форме ( $2H/\varepsilon_s \rightarrow H$ ), перепишем Гамильтониан:

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{dx_n}{dt} \right)^2 + (1 - \cos x_n) + \frac{g}{2} (x_{n-1} - x_n - a_0)^2 \right\}, \quad (1.52)$$

где  $a_0 \rightarrow (2\pi/a_s)a_0$ ,  $x_n \rightarrow (2\pi/a_s)x_n$ ,  $t \rightarrow (2\pi/a_s)(\varepsilon_s/2m_a)^{1/2}t$ ,  $g \rightarrow (a_s/2\pi)^2 g(\varepsilon_s/2)^{-1}$ .

Соответствующее уравнение движения цепочки:

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} + \sin x_n - g(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) = 0. \quad (1.53)$$

Полученное уравнение не содержит явной зависимости от равновесного шага цепи  $a_0$ .

Если мы будем рассматривать случай, когда  $a_s = a_0$ , т.е. когда на каждую частицу цепи приходится минимум потенциала подложки, или другими словами, коэффициент покрытия  $\Theta$  (отношение числа частиц к числу минимумов потенциала) равен единицы, удобно перейти к новым переменным для смещений частиц  $u_n$ . Смещения определяются соотношением  $x_n = na_s + u_n$ . Если смещения малы,  $|u_n| \ll a_s$ , уравнение движения можно линеаризовать:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} + u_n - g(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0. \quad (1.54)$$

Данное уравнение движения описывает фоновые моды цепи  $u_n \propto \exp[i\omega_{ph}(k)t - ikn]$ . В случае, когда смещения не являются малыми, линейное приближение перестаёт работать и появляются нелинейные моды. Такие моды описываются в континуальном приближении для дискретной цепи. Процесс получения уравнений движения в континуальном приближении из дискретной модели предложил Розенау [143]. Этот метод применим для динамики цепей с произвольным потенциалом подложки и межчастичного взаимодействия. Континуальное приближение сводится к уравнению синус-Гордона с возмущением, связанным с дискретностью цепи. Однако, если пренебречь эффектами дискретности, получится невозмущённое уравнение синус-Гордон:

$$\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} + d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = 0. \quad (1.55)$$

В физике конденсированного состояния модель Френкеля-Конторовой и её континуальное приближение применяются для описания абсорбированного слоя на поверхности кристалла [144], переноса волны плотности заряда [145], сухого трения [146], джозефсоновских контактов [147].

## Глава 2. Монте-Карло моделирование фазового перехода в квазиодномерном мультиферроике на подложке

### 2.1 Квазиодномерный мультиферроик $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$

В последние годы большое внимание исследователей мультиферроиков приковано к композитам ферромагнитных, антиферромагнитных и сегнетоэлектрических материалов. Это обусловлено их широким применением в устройствах спинтроники. Такие гетероструктуры могут быть созданы из бислоев ФМ и СЭ структур, что позволяет управлять магнитными и электрическими свойствами с помощью передачи деформации вдоль поверхности [148; 149]. В работе [150] описывается сильное влияние деформаций, вызванных структурным фазовым переходом в СЭ подложке  $\text{BaTiO}_3$  на магнитные свойства ферромагнетика  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_6$ . Влияние подложки может оказаться существенным лишь в приграничном слое магнетика. Таким образом, заметное изменение свойств материала в зависимости от подложки можно ожидать для 2D или 1D-материалов. Примером 2D-мультиферроиков служат тонкие плёнки, примером 1D-мультиферроика является соединение  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  [151].

$\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  имеет ромбоэдрическую структуру (кристаллографическая группа  $\text{R}\bar{3}\text{c}$ ), как у  $\text{K}_4\text{CdCl}_6$ .  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  может рассматриваться как легированный композит  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ , представляющий собой наиболее часто изучаемый композит из-за его сложных магнитных свойств [152–155].  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  относится к мультиферроикам II типа в классификации Хомского. Он состоит из параллельных цепочек  $\text{CoMnO}_6$ , которые состоят из чередующихся тригональной призмы  $\text{CoO}_6$  и восьмигранника  $\text{MnO}_6$ , выровненных вдоль оси  $c$  при малом расстоянии между ионами  $\text{Co}$  и  $\text{Mn}$  ( $2.646 \text{ \AA}$ ). Цепочки  $\text{CoMnO}_6$  разделены ионами  $\text{Ca}^{2+}$  и формируют треугольные решетки в плоскости  $ab$  (рисунок 2.1).

Т.к. взаимодействие внутри цепи намного сильнее взаимодействия между ними, этот композит может быть описан одномерной моделью Изинга для цепочки спинов с конкурирующим ферромагнитным взаимодействием ближних соседей ( $J_{FM}$ ) и антиферромагнитным взаимодействием следующих соседей ( $J_{AFM}$ ) [156]. При  $|J_{AFM}/J_{FM}| > 1/2$ , основным состоянием магнитной решетки

ки является *up-up-down-down* ( $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ ) [157]. Если магнитные ионы чередуются вдоль цепи, такое магнитное упорядочение нарушает инверсную симметрию и приводит к возникновению электрической поляризации через обменную стрикцию. Этот механизм показан на рисунке 2.1(a). Обменное взаимодействие сокращает расстояния между параллельными спинами и увеличивает между антипараллельными. Это приводит к возникновению электрической поляризации в магнитной структуре  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ . В работах [158; 159] с помощью теории функционала плотности и *ab initio* расчета электронной структуры было подтверждено возникновение сегнетоэлектричества в результате изменения расстояний Co-Mn и магнитного упорядочения  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ . А в работе [160] представлена оригинальная микроскопическая модель образования структуры  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  в мультиферроиках II типа, построенная с помощью метода ренормгрупп.

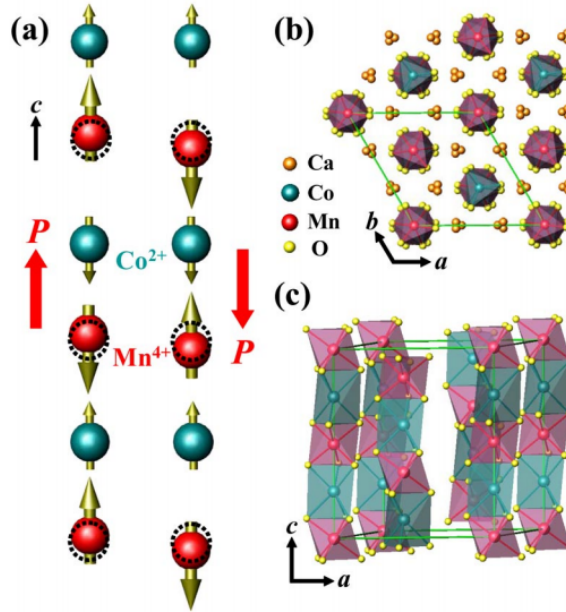


Рисунок 2.1 — (a) Цепочка Изинга с  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  упорядочением спинов и соответствующий порядок ионов, при котором электрическая поляризация вызвана обменной стрикцией. Показаны 2 возможных варианта реализации направления поляризации. Начальные позиции атомов показаны штрихованными кругами. (b, c) Структура кристалла  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ . Линией показана элементарная ячейка кристалла [156].

В работе [156] экспериментально обнаружено появление сегнетоэлектричества в кристалле  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  ( $x = 0.96$ ). Результаты того исследования представлены на рисунке 2.2. На рисунке 2.2(a) видно, что поляризация плавно растёт до температуры перехода 16.5 К, быстро растёт ниже  $T \sim 10$  К и

достигает значения  $\sim 90$  мкКл/м<sup>2</sup> при 2 К. При появлении магнитного поля, приложенного вдоль оси  $c$ , электрическая поляризация уменьшается. Появление поляризации при 16,5 К совпадает с началом магнитного упорядочения, что обозначено широким пиком магнитной восприимчивости  $\chi(T)$ , показанном на рисунке 2.2(b). Удельная теплоёмкость также испытывает подъем на этой температуре. Температурная зависимость диэлектрической постоянной вдоль оси  $c$  начинает отклоняться от линейной начиная с температуры 16.5 К без каких-либо видимых аномалий (рис. 2.2(c)). Вместо этого  $\epsilon_c(T)$  имеет пик при температуре  $\sim 8$  К с последующим резким уменьшением при более низких температурах. Изинговоe строение этого композита четко отображается в большой анизотропии  $d\chi(T)/dT$ .

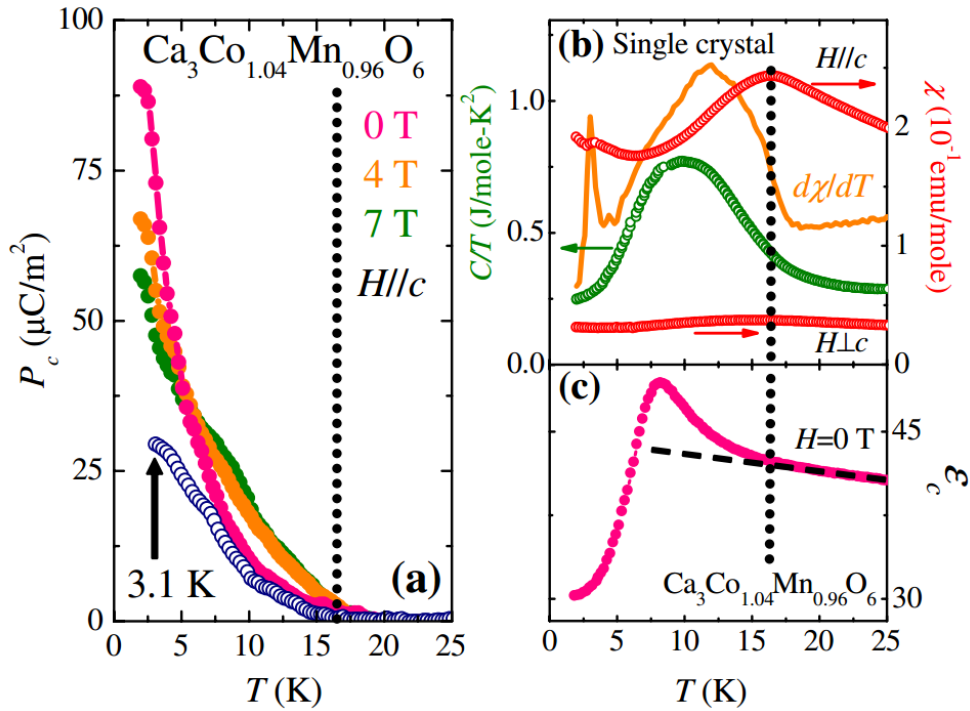


Рисунок 2.2 — (a) Электрическая поляризация кристалла  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  ( $x = 0.96$ ) вдоль направления цепочки ( $P \parallel c$ ), полученная после нагревания. Образцы поляризованы после охлаждения с 40 К до 2 К (заполненные кружки) и до 3.1 К (полые кружки) перед измерением. (b) Температурная зависимость магнитной восприимчивости  $\chi(T) = m/H$ , полученная при приложенном магнитном поле  $H = 0.2$  Т вдоль и поперёк направления цепочки  $c$ . Производная по температуре  $d\chi/dT$  и теплоёмкость при нулевом магнитном поле ( $C/T$ ) также приведены. (c) диэлектрическая проницаемость вдоль оси  $c$ . Пунктирной линией обозначена высокотемпературная зависимость  $\epsilon_c$ . [156].

Последующие работы показали, что спиновый дальний порядок сохраняется только для  $\text{Ca}_3\text{Co}_{1+x}\text{Mn}_{1-x}\text{O}_6$  [161], а в бездефектном  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  дальний порядок пропадает и макроскопическая поляризация ослабевает [162]. В работе [163] показана релаксорная природа ферроэлектрического фазового перехода, которая подразумевает существование полярных нанобластей [164]. А легированное соединение  $\text{Ca}_{2.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_6$  демонстрирует довольно большой коэффициент МЭ взаимодействия при комнатной температуре (около 1.7 мВ/см·Э) и уменьшение запрещённой зоны с 2.25 до 1.8 эВ [165], что позволяет говорить об его потенциальном применении в сенсорах, фильтрах и различных исполнительных устройствах для средних частот.

## 2.2 Монте-Карло модель квазиодномерного мультиферроика $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$

При моделировании квазиодномерного мультиферроика  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  будем использовать одномерную модель Изинга для цепочки спинов с конкурирующими взаимодействиями (1D ANNNI модель).

Магнитный момент ионов Mn примерно в 3 раза больше магнитного момента ионов Co [156], поэтому АФМ взаимодействие между следующими соседями пары Mn-Mn должно быть сильнее, чем для пары Co-Co ( $J_{AFM_{Mn}} < J_{AFM_{Co}} < 0$ ). Для простоты предположим, что  $J_{AFM_{Mn}} = 9J_{AFM_{Co}}$ . Зависимость от расстояния между соседними спинами для  $J_{FM}$  и  $J_{AFM}$  можно представить в виде линейной аппроксимации [166]:

$$\begin{aligned} J_{FM}(r_{i,i+1}) &= J_{FM_0} e^{\varphi \frac{r_{i,i+1} - r_0}{r_0}} \approx J_{FM_0} \left( 1 + \varphi \frac{r_{i,i+1} - r_0}{r_0} \right) \\ &= J_{FM_0} [1 + \varphi (d_{i+1} - d_i)] \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$J_{AFM}(r_{i,i+2}) = J_{AFM_0} e^{\varphi \frac{r_{i,i+2} - 2r_0}{2r_0}} = J_{AFM_0} \left[ 1 + \frac{\varphi}{4} (d_{i+2} - d_i) \right], \quad (2.2)$$

где  $J_{FM_0}$ ,  $J_{AFM_0}$  - обменные интегралы ФМ и АФМ взаимодействия без обменной стрикции ( $J_{FM_0} > 0$ ,  $J_{AFM_0} < 0$ ),  $\varphi$  определяет силу взаимодействия между спинами и смещениями.  $\varphi < 0$  означает, что взаимодействие становится сильнее, если спины располагаются ближе друг к другу и наоборот.  $r_0$  - начальное

расстояние между ионами без обменной стрикции,  $r_{i,j}$  - расстояние между  $i$ -ым и  $j = i + 1, i + 2$  ионами под влиянием обменной стрикции.  $d_i$  - смещение  $i$ -го иона, нормированное на  $r_0$ , оно принимает положительное значение при сближении с  $i + 1$  ионом. Согласно выражению (2.1) и (2.2), изменения в  $J_{FM}$  и  $J_{AFM}$  связаны с изменением расстояния между спинами, следовательно, относительное смещение ионов является причиной обменной стрикции. Для простоты, предположим, что движутся только ионы Co, то есть  $d_i \neq 0$  для Co, а для Mn  $d_i = 0$ . Тогда гамильтониан одномерной цепочки Изинга можно записать в виде:

$$H = H_{FM} + H_{AFM} + H_M + H_E + H_{el} + H_{FK} \quad (2.3)$$

$$H_{FM} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{FM}(r_{i,j}) S_i S_j; H_{AFM} = - \sum_{[i,j]}^{Mn} J_{AFM_{Mn}} S_i S_j - \sum_{[i,j]}^{Co} J_{AFM_{Co}}(r_{i,j}) S_i S_j;$$

$$H_M = -hg\mu_B \sum_i S_i; H_E = -E \sum_i qd_i; H_{el} = \frac{1}{2}k \sum_i d_i^2;$$

$$H_{FK} = -\alpha_{FK} \sum_i \cos \left( \frac{2\pi(i + d_i)}{b_{FK}} \right),$$

где  $H_{FM}$  и  $H_{AFM}$  - гамильтонианы конкурирующих ФМ и АФМ взаимодействий, угловые скобки означает суммирование по парам ближайших соседей, квадратные скобки - суммирование по парам следующих за ближайшими соседями.  $H_M$  и  $H_E$  представляют собой энергии магнитного и электрического полей соответственно,  $h$  - внешнее магнитное поле,  $g$  - фактор Ланде,  $\mu_B$  - магнетон Бора,  $E$  - внешнее электрическое поле,  $q$  - заряд движущихся ионов (для Co  $q = 2$ ).  $H_{el}$  - упругая энергия,  $k$  - коэффициент упругости,  $H_{FK}$  описывает периодический потенциал подложки,  $\alpha_{FK}$  - амплитуда потенциала,  $b_{FK}$  - период потенциала.

Таблица 2 — Параметры моделируемой системы.

| Параметр       | Значение | Параметр  | Значение |
|----------------|----------|-----------|----------|
| $J_{FM_0}$     | 360      | $\varphi$ | -8       |
| $J_{AFM_{Mn}}$ | -262.8   | $k$       | 136000   |
| $J_{AFM_{Co}}$ | -29.2    | $g$       | 2        |

Постоянная Больцмана принята за единицу, поэтому температура измеряется в единицах энергии. Остальные параметры рассчитаны согласно этому. Значения параметров моделирования показаны в таблице 2. Так как реальные

значения этих параметров нельзя получить из эксперимента, они были выбраны в ходе качественного сравнения результатов моделирования и эксперимента [166].

МК моделирование проводилось на одномерной цепочке Изинга, длиной  $L = 4000$  с периодическими граничными условиями. Переход в новое состояние осуществляется согласно алгоритму Метрополиса:

1. Формируем начальную конфигурацию для системы спинов  $S_i$  и смещений  $d_i$ .
2. Производим пробное изменение конфигурации магнитной подсистемы (переворачиваем спин  $S_i$ ).
3. Вычисляем изменение энергии при пробном изменении конфигурации  $\Delta E$ .
4. Если  $\Delta E \leq 0$ , принимаем новую конфигурацию и переходим к шагу 8.
5. Если  $\Delta E > 0$ , вычисляем вероятность перехода в новое состояние  $w = e^{(-\Delta E/k_B T)}$ .
6. Генерируем случайное число  $r$  в интервале  $(0, 1)$ .
7. Если  $r \leq w$ , принимаем новую конфигурацию, в противном случае новую конфигурацию отбрасываем и возвращаемся к старой.
8. Производим пробное изменение конфигурации электрической подсистемы (генерируем случайным образом новые значения смещения  $d_i$  (только для  $S_0$ ) в интервале от  $-0.05$  до  $0.05$ ).
9. Повторяем шаги 3-7 для перехода в новое состояние электрической подсистемы.
10. Определяем значения требуемых физических величин.
11. Повторяем шаги 2-9 для получения достаточного числа конфигураций (для каждого значения  $T$  первые 300 000 шагов Монте-Карло отбрасывались для достижения термодинамического равновесия, термодинамические величины рассчитывались в течение следующих 50 000 шагов. Один МК шаг соответствует попытке перевернуть каждый из  $L$  спинов магнитной решетки  $S_i$  и попытке изменить каждое из  $L/2$  смещений электрической подсистемы  $d_i$ ).
12. Вычисляем средние по конфигурациям, которые статистически независимы.

По аналогии с экспериментом [156], первоначально система поляризована сильным электрическим полем  $E_0 = 1200$  при низкой температуре ( $T = 2$ ).

С повышением температуры  $E_0$  отключалось, термодинамические параметры рассчитывались при слабом электрическом поле  $E = 4$ .

Электрическая восприимчивость вдоль цепи рассчитывается согласно статистической флуктуации [167]:

$$\chi_e = \frac{\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2}{T}. \quad (2.4)$$

Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  рассчитывается согласно:

$$\varepsilon = \chi_e + 1. \quad (2.5)$$

## 2.3 Результаты моделирования

### 2.3.1 Моделирование без подложки

Результаты моделирования без учета периодического потенциала подложки приведены на рисунке 2.3. На нём приведены полученные температурные зависимости поляризации  $P$  (рис. 2.3(а)), магнитной восприимчивости (рис. 2.3(б)), диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  (рис. 2.3(в)) и соответствующие экспериментальные кривые для  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  ( $x \approx 0.96$ ) [156]. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными говорит о их качественном совпадении.

Широкий пик кривой  $\chi(T)$  свидетельствует о наличии фазового перехода из АФМ в парамагнитную фазу при температуре  $T_p \approx 16$ . Спад электрической поляризации происходит ниже  $T_p$ . Включение магнитного поля уменьшает поляризацию при  $T < 6$  и увеличивает при более высокой температуре. Аналогично ведут себя и экспериментальные кривые. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости имеет широкий пик ниже температуры перехода  $T_p$  (рис. 2.3(в)).

На рисунке 2.4 показаны положения отдельных спинов и смещений моделируемой системы при  $T = 2$  (а),  $T = 10$  (б),  $T = 18$  (в) ( $h = 0$ ). На этом рисунке видно, что состояние  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  приводит к смещению ионов вдоль цепи и возникновению макроскопической поляризации (рис. 2.4(а)). В системе без

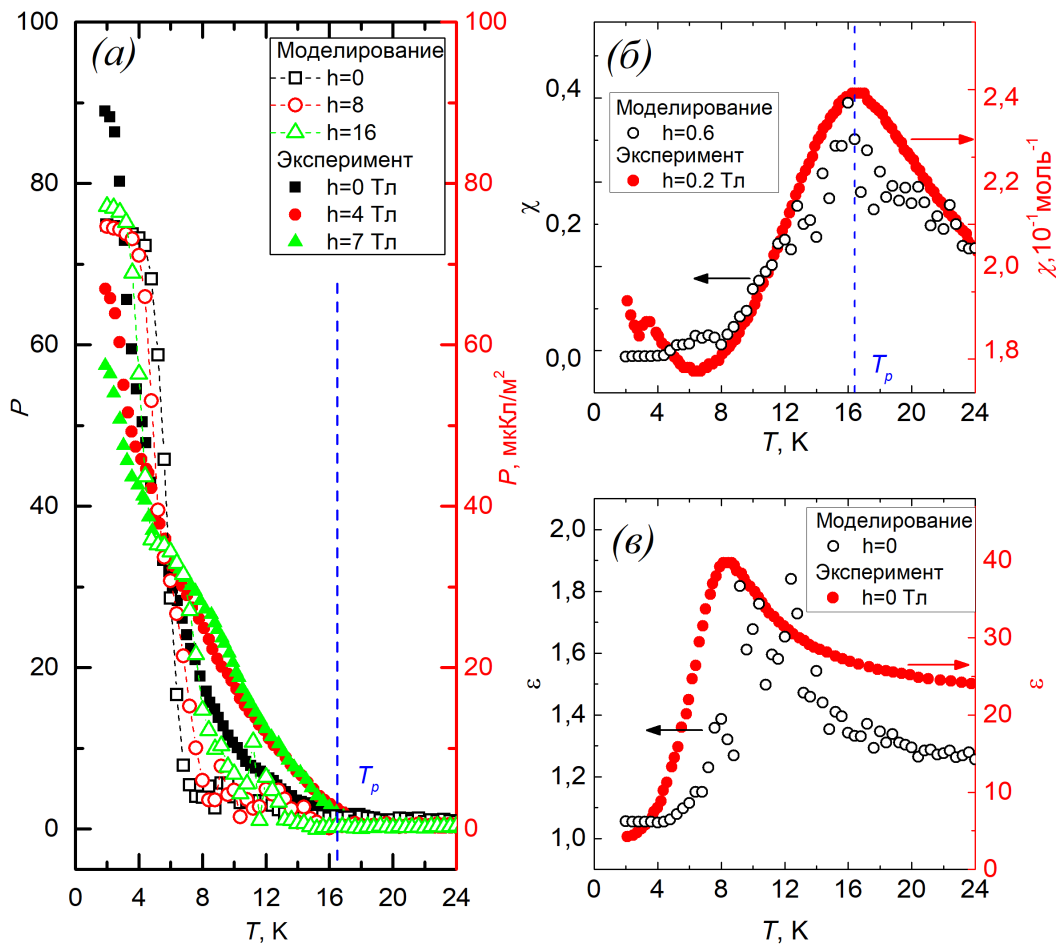


Рисунок 2.3 — Температурные зависимости поляризации (а), магнитной восприимчивости (б) и диэлектрической проницаемости (в), полученные при моделировании и из эксперимента для  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  ( $x = 0.96$ ) [156].

электрического поля оба направления смещения вдоль цепочки равновероятны, однако сильное электрическое поле создаёт доминирующее направление смещения. В результате этого, сегнетоэлектрические домены при низкой температуре замораживаются в структуре  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ . С повышением температуры эти домены начинают плавиться, и смещения ионов уже не позволяют сохранять направленную поляризацию (рис. 2.4(б)). Противодействие между поляризованными в противоположных направлениях доменами приводит к резкому снижению макроскопической поляризации  $P$ . Процесс плавления доменов также чувствителен к электрическому полю, т.к. оно может повернуть домены в одном направлении, увеличивая тем самым макроскопическую поляризацию  $P$ . Об этом говорит пик зависимости  $\epsilon(T)$  (рис. 2.3(в)). Когда температура достигает  $T_p$ , структура  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  пропадает и потеря упорядоченности смещений ионов носит параэлектрический

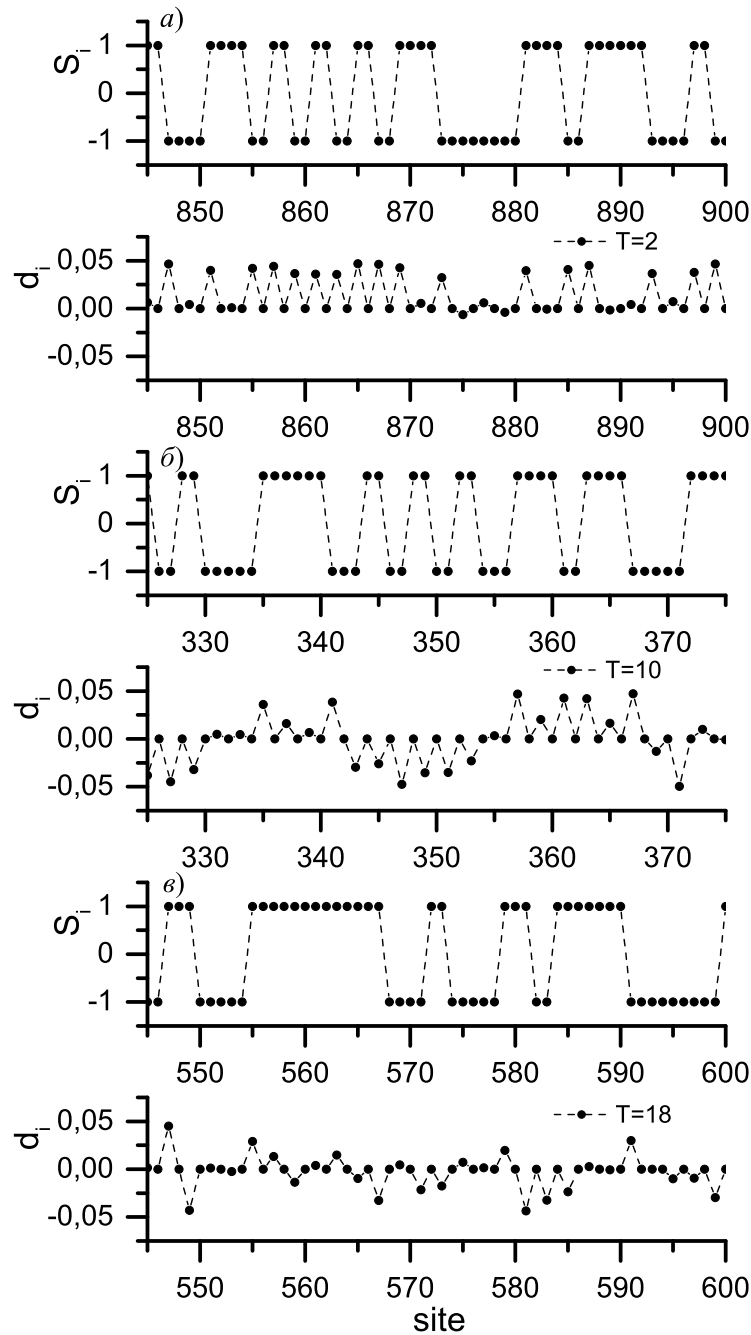


Рисунок 2.4 — (а) Изображение отдельных спинов и смещений ионов при  $T = 2$ ;  $T = 10$  (б);  $T = 18$  (в).

характер (рис. 2.4(в)), что совпадает с линейным поведением зависимости  $\varepsilon(T)$  выше  $T_p$  (рис. 2.3(в)).

Далее рассмотрим температурные зависимости магнитных и электрических параметров с помощью анализа энергии системы. Основные компоненты энергии представляют собой: ФМ взаимодействие ближайших соседей  $H_{FM}$ ,

АФМ взаимодействие следующих за ближайшими соседями  $H_{AFM}$ , энергия магнитного поля  $H_M$  и упругая энергия  $H_{el}$ .

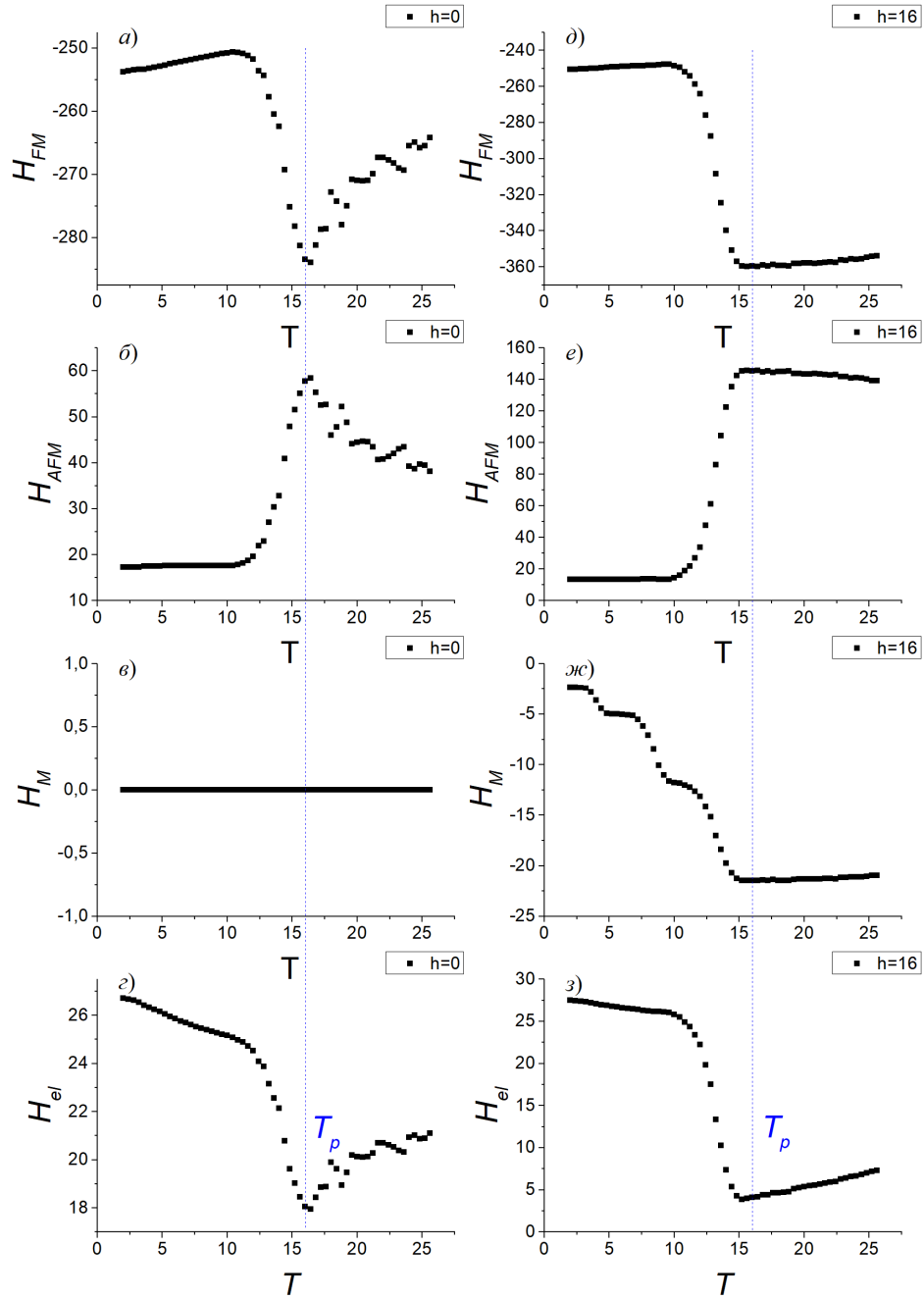


Рисунок 2.5 — (а)  $H_{FM}$ , (б)  $H_{AFM}$ , (в)  $H_M$  и (г)  $H_{el}$  как функции от  $T$  при  $h = 0$  слева. Соответственно, (д)  $H_{FM}$ , (е)  $H_{AFM}$ , (ж)  $H_M$  и (з)  $H_{el}$  как функции от  $T$  при  $h = 16$  справа.

Температурные зависимости этих компонентов при различных полях  $h = 0$  и  $h = 16$  слева и справа соответственно представлены на рисунке 2.5.  $H_{FM}$ ,  $H_{AFM}$  и  $H_{el}$  имеют особенности при температуре перехода  $T_p$  (рис. 2.5(а, б,

2)).  $H_{FM}$  и  $H_{el}$  имеют минимумы, а  $H_{AFM}$  – максимум, что говорит о том, что  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  состояние исчезает и обменная стрикция при этой температуре наиболее слабая. Движение ионов подавляется, о чем свидетельствует минимум  $H_{el}$ . На макроскопическом уровне, поляризация  $P$  пропадает, и магнитная восприимчивость  $\chi$  имеет широкий пик, указывая на антиферромагнитный переход. При появлении поля  $h$ , приложенного вдоль цепочки зависимость  $H_{FM}$  понижается (рис. 2.5(д)), а  $H_{AFM}$  повышается (рис. 2.5(е)), что говорит о большем преобладании ферромагнитного взаимодействия над антиферромагнитным. Таким образом, появление магнитного поля  $h$  подавляет обменную стрикцию и разрушает структуру  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ . Ступенчатая форма  $H_M$  (рис. 2.5(жс)) приводит к нескольким изгибам зависимости  $P(T)$  при наличии магнитного поля вдоль цепочки  $h$  (рис. 2.3(а)).

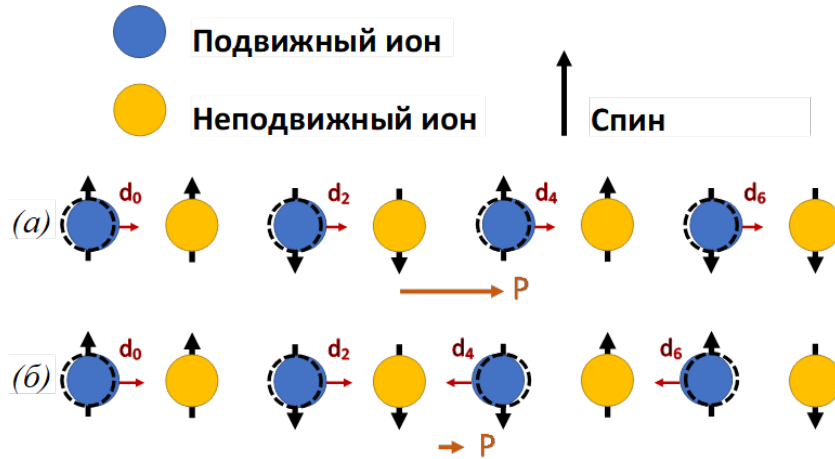


Рисунок 2.6 — Формирование электрической поляризации. Красными стрелками указаны смещения ионов. (а) цепочка Изинга с  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  упорядочением спинов. (б) магнитный домен из трёх сонаправленных спинов приводит к разнонаправленным смещениям.

Рассмотрение эволюции спиновой и электрической подсистем имеет важное значение в объяснении поведения магнитных и электрических параметров системы. На рисунке 2.6 представлена моделируемая одномерная цепочка Изинга. На рис. 2.6(а) показана цепочка спинов с  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  упорядочением, на рис. 2.6(б) показано влияние магнитного домена с нечетным количеством спинов. Видно, что магнитный домен с нечетным количеством спинов способствует образованию смещений противоположных направлений, тем самым уменьшая макроскопическую поляризацию. Таким образом, домены с четным и нечетным количеством спинов играют различную роль в формировании макроскопической поляризации.

С целью изучения эволюции модулируемой системы рассмотрим распределение количества магнитных доменов  $SDN(n_s)$ , где длина домена  $n_s$  определяется как число сонаправленных спинов, стоящих рядом друг с другом. Также рассмотрим количество электрических доменов  $DDN(n_d)$ , где  $n_d$  – длина электрического домена. Причем электрические домены разделены на положительные PD-домены, состоящие из смещений  $d_i > 0.01$ , и отрицательные ND-домены, состоящие из смещений  $d_i < 0.01$ . Температурная зависимость  $SDN(n_s)$  представляет интерес для изучения эволюции спиновой системы, а функция  $DDN$  дает информацию о микроскопической поляризации в различных состояниях.

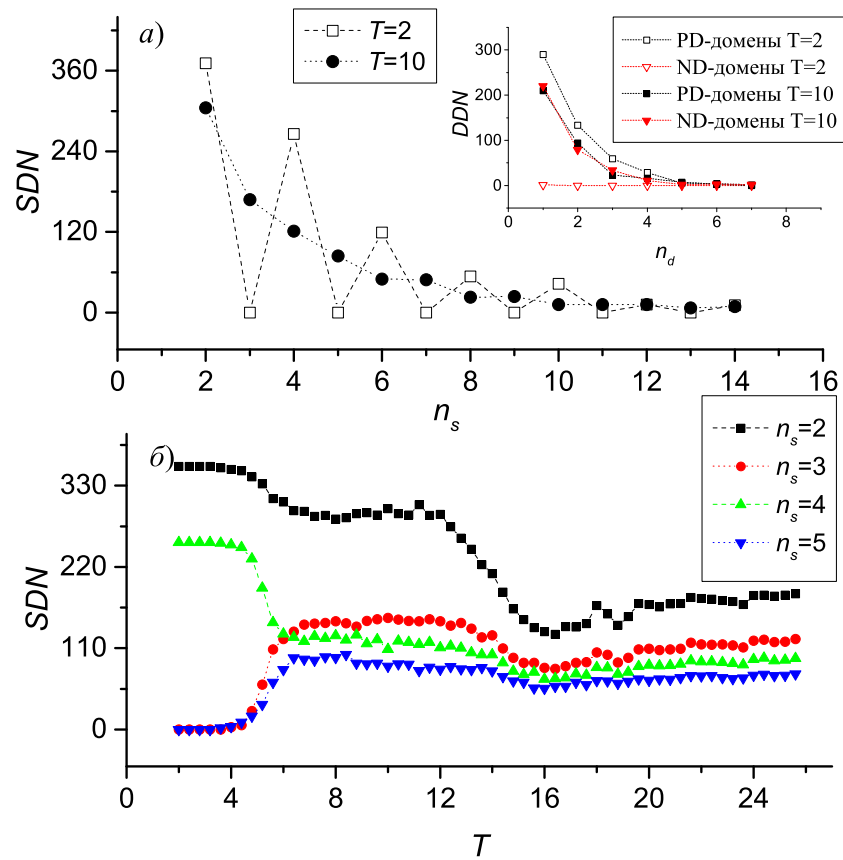


Рисунок 2.7 — (а) Количество магнитных доменов  $SDN(n_s)$  при  $T = 2$  и  $T = 10$ . На вставке представлена зависимость  $DDN(n_d)$  для положительных PD и отрицательных ND доменов при  $T = 2$  и  $T = 10$ . (б) Температурная зависимость  $SDN$  для  $n_s=2, 3, 4, 5$ .

На рисунке 2.7(а) представлены функции  $SDN(n_s)$  и  $DDN(n_d)$  для  $T = 2$  и  $T = 10$ . При  $T = 2$  в системе присутствуют домены только с четным количеством спинов. На вставке рис. 2.7(а) также видно, что при  $T = 2$  практически

нет отрицательных доменов. С повышением температуры кривая  $SDN(n_s)$  становится гладкой и появляются домены с нечетным количеством спинов и отрицательные электрические домены. Это говорит о том, что магнитные домены с четным количеством спинов способствуют появлению микроскопической поляризации, а появление в структуре доменов с нечетным количеством магнитных спинов способствует появлению отрицательных электрических доменов и, соответственно, уменьшению поляризации. При  $T = 10$  кривые  $DDN(n_d)$  для отрицательных и положительных электрических доменов практически совпадают (вставка рис. 2.7(а)).

На рисунке 2.7(б) представлены температурные зависимости количества четных и нечетных доменов (с длиной от 2 до 5 спинов) при  $h = 0$ . Отсюда видно, что при низкой температуре нечетных доменов крайне мало, в то время как четных много. С повышением температуры ситуация резко меняется: количество четных доменов резко сокращается, а нечетных – резко увеличивается. Это говорит о разрушении структуры  $\uparrow\downarrow$  и уменьшении электрической поляризации. При дальнейшем повышении температуры количество разных спинов остаётся приблизительно на одном уровне до температуры перехода в парамагнитную фазу  $T_p \approx 16$ . На этом участке ( $T \approx 6 \dots 12$ ) нечетные спиновые домены приводят к образованию электрических доменов, крайне чувствительных к внешнему электрическому полю, что соответствует пику на температурной зависимости диэлектрической проницаемости (рис. 2.3(в)).

На рисунке 2.8(а) представлены температурные зависимости электрической поляризации системы при малых изменениях внешнего электрического поля. Как видно из этих зависимостей, малое изменение внешнего электрического поля на участке  $T \approx 6 \dots 12$  приводит к заметному изменению величины электрической поляризации, однако при других температурах изменений практически не наблюдается.

Влияние внешнего поля  $E$  на количество электрических доменов показано на рисунке 2.8(б). При низкой величине  $E = 4$  количество положительных и отрицательных доменов почти одинаково, однако, при более высоком значении поля  $E = 20$ , количество положительных доменов заметно больше, чем отрицательных. Внешнее электрическое поле, увеличивает количество доменов, направленных вдоль поля (PD-домены) и сокращает количество доменов, направленных против поля (ND-домены).

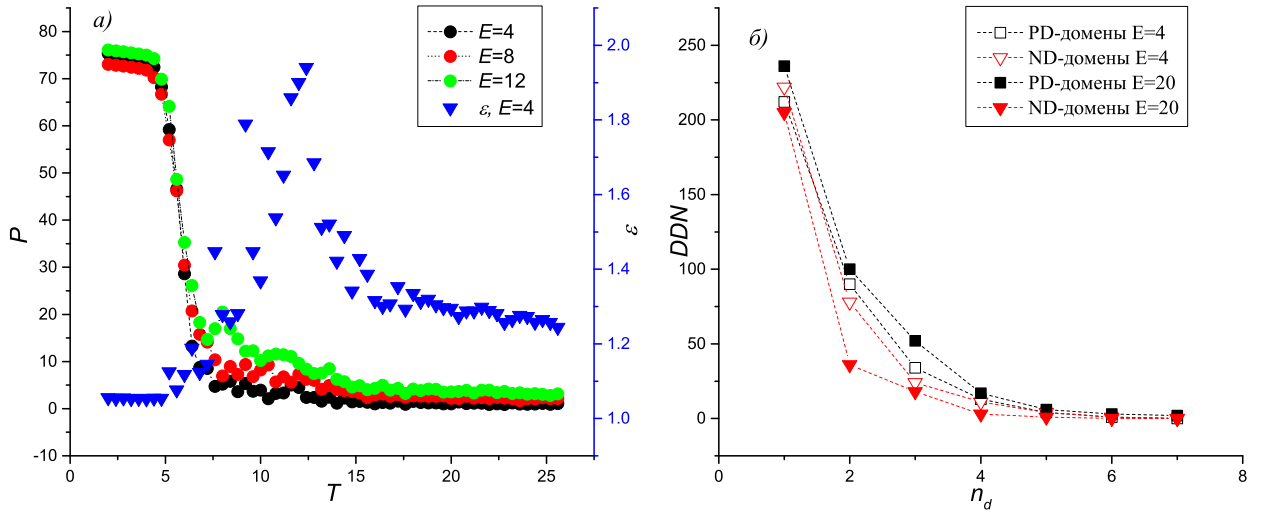


Рисунок 2.8 — (а) Диэлектрическая проницаемость при  $E = 4$  и температурные зависимости поляризации при  $E = 4, 8, 12$ . (б) Функция  $DDN(n_d)$  для положительных PD и отрицательных ND доменов при  $T = 10$  и  $E = 4$  и  $E = 20$ .

### 2.3.2 Моделирование с учётом влияния подложки

На рисунке 2.9 показано изменение электрической поляризации под влиянием периодического потенциала подложки при наличии и в отсутствии

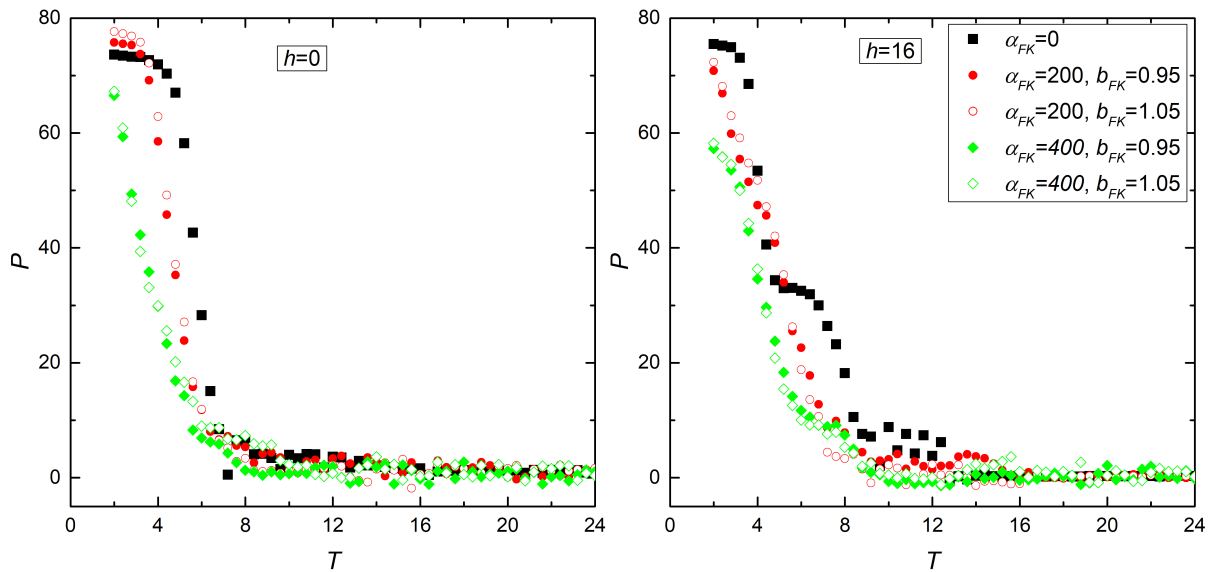


Рисунок 2.9 — Температурные зависимости поляризации с учётом влияния периодического потенциала подложки.

внешнего магнитного поля. Были рассмотрены 2 случая, когда период потенциала подложки был больше и меньше межатомного расстояния Co-Mn на 5%. Можно заметить, что увеличение амплитуды потенциала уменьшает макроскопическую поляризацию. Однако отклонение периода потенциала от постоянной решётки  $\text{CoMnO}_6$  в сторону увеличения или в сторону уменьшения действует на величину ослабления поляризации одинаково.

Для дальнейшего анализа влияния потенциала подложки на магнитные и электрические параметры системы мы проанализировали отдельные составляющие энергии системы, такие как  $H_{FM}$ ,  $H_{AFM}$ ,  $H_{el}$ , а также энергию периодического потенциала подложки  $H_{FK}$ . На рисунке 2.10 представлены температурные зависимости этих составляющих без влияния подложки (чёрные квадраты) и с учётом влияния подложки ( $\alpha_{FK} = 400$ ), когда период потенциала подложки меньше межатомного расстояния Co-Mn на 5% (рис. 2.10(заполнен-

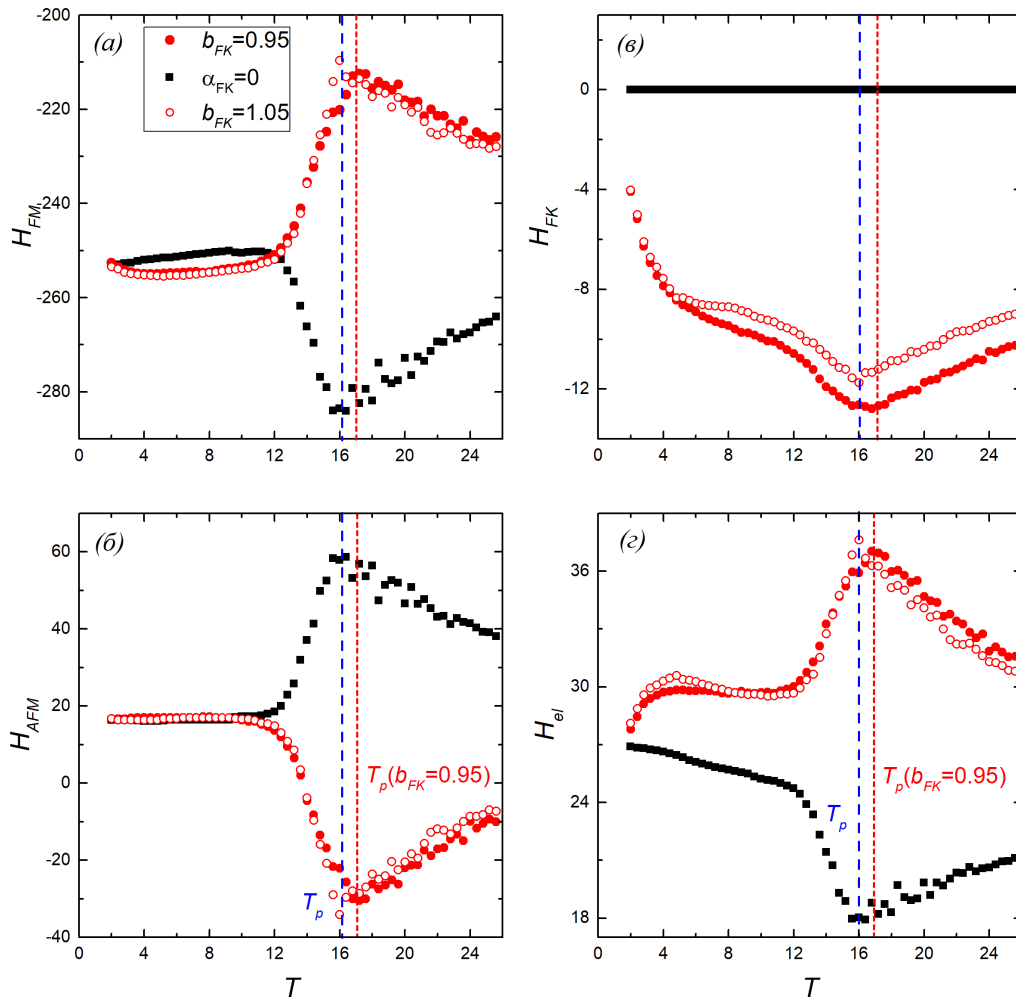


Рисунок 2.10 — Температурные зависимости  $H_{FM}$ ,  $H_{AFM}$ ,  $H_{el}$ ,  $H_{FK}$  при наличии потенциала подложки (кружки) и в его отсутствие (черные квадраты).

ные кружки)) и больше на 5% (рис. 2.10(пустые кружки)). Зависимости  $H_{FM}$  и  $H_{AFM}$  имеют особенности при температуре перехода  $T_p$ , что говорит о том, что магнитная структура разрушается, причем сама  $T_p$  при учете влияния подложки смещается чуть выше при уменьшении периода потенциала. При этом характер зависимостей  $H_{FM}$  и  $H_{AFM}$  при  $T < 12$  заметно не изменяется с учетом влияния подложки, однако при более высоких температурах  $H_{FM}$  вместо минимума имеет максимум, а  $H_{AFM}$  вместо максимума имеет минимум. Это говорит об изменении баланса ФМ/АФМ взаимодействий в сторону АФМ взаимодействия при наличии потенциала подложки и в сторону ФМ взаимодействия в случае его отсутствия.

Поведение  $H_{el}$  при появлении потенциала подложки также меняет свой вид. При  $T_p$  вместо минимума в отсутствие подложки наблюдается максимум (рис. 2.10 (г)). При этом энергия  $H_{FK}$  имеет минимум (рис. 2.10(в)). Это говорит о том, что вблизи  $T_p$  в системе наблюдаются максимальные смещения при появлении подложки. Однако, с появлением потенциала подложки роста макроскопической поляризации при  $T_p$  не происходит (рис. 2.9). Чтобы это объяснить, рассмотрим подробнее эволюцию магнитной подсистемы.

На рисунке 2.11(а) представлено распределение магнитных доменов  $SDN(n_s)$  с длиной от 2 до 5 в зависимости от температуры. Потенциал подложки не изменяет поведение  $SDN(n_s)$  в области  $T < 10$  за исключением уменьшения температуры, для которой  $SDN(3) \approx SDN(4) \approx SDN(5)$ . Сильно отличается поведение функции  $SDN$  для  $n_s = 2$  при  $T > 10$ . Количество доменов длиной 2 спина растёт до  $T_p$ . При приближении к  $T_p$  увеличивается и количество доменов с нечётным  $n_s$ .

На рисунке 2.11(б) показано распределение функции  $SDN$  при трёх значениях  $T = 2, 10, 15$ . Потенциал подложки меняет поведение функции  $SDN$  при  $T = 10$  и  $T = 15$ . При  $T = 2$  мы наблюдаем схожую зависимость с рис. 2.7(а) без влияния подложки. При  $T = 10$  возрастает количество доменов с нечётным  $n_s$ , причем их число становится больше, чем число с четным  $n_s$ . При  $T = 15$  сильно увеличивается число доменов с длиной 2 спина. Это можно объяснить увеличением влияния АФМ взаимодействия вблизи  $T_p$  и уменьшение влияния ФМ-взаимодействия, о чем свидетельствуют зависимости на рис. 2.10(а, б). Таким образом, несмотря на значительное увеличение числа магнитных доменов длиной  $n_s = 2$  вблизи  $T_p$ , поляризация системы значительно не увеличивается. Смещения, образованные магнитными доменами с чётными  $n_s$  компенсируют-

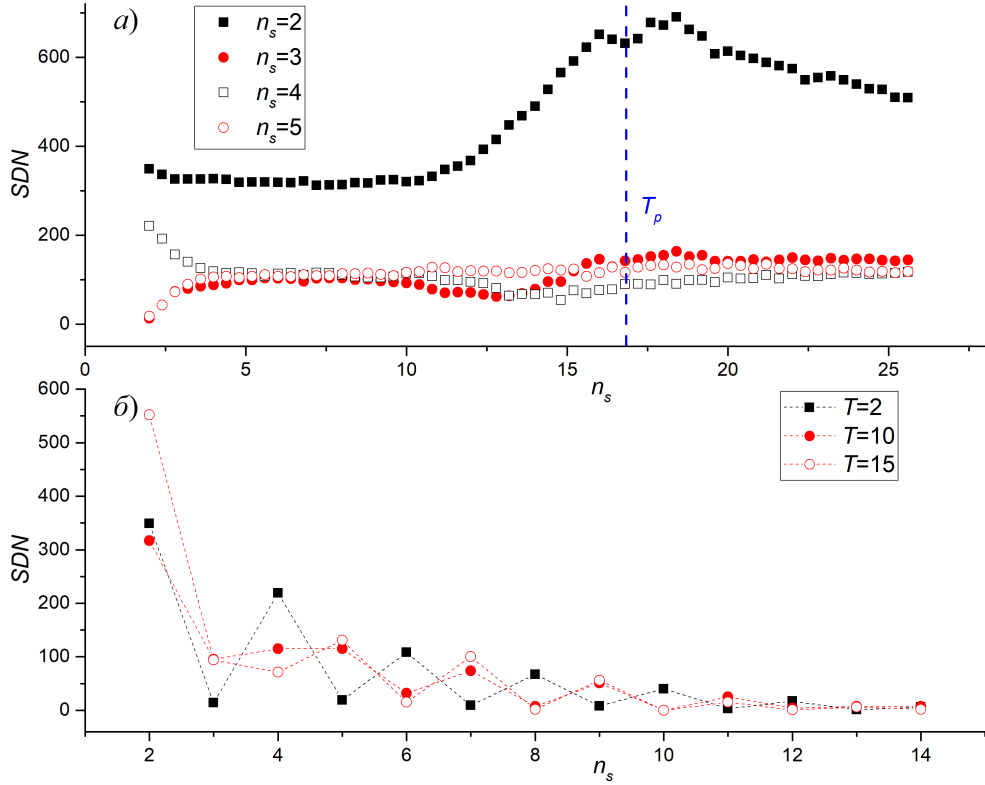


Рисунок 2.11 — (а) Количество магнитных доменов с длиной от 2 до 5 спинов в зависимости от температуры, (б) Распределение количества магнитных доменов при температуре  $T = 2, 10, 15$ .  $\alpha_{FK} = 400$ ,  $b_{FK} = 0.95$ .

ся противоположно направленными смещениями, образованными доменами с нечётным  $n_s$ .

## 2.4 Выводы по главе

Представленные в данной главе результаты подтверждают предположение о том, что сегнетоэлектричество в кристалле  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  вызвано обменной стрикцией между магнитными ионами в результате формирования спиновой структуры  $\uparrow\downarrow$ . Спиновая фрустрация в структуре  $\uparrow\downarrow$  возникает в результате наличия конкурирующих взаимодействий: ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов и антиферромагнитного взаимодействия следующих за ближайшими спинами. Данное предположение подтверждено также работами [158; 159] с помощью теории функционала плотности и первопринципного *ab initio* расчета электронной структуры.

Полученные температурные зависимости термодинамических параметров системы, таких как электрическая поляризация, магнитная восприимчивость и диэлектрическая проницаемость, качественно хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными в работе [156] при изучении кристалла  $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$  ( $x = 0.96$ ). А анализ эволюции моделируемой системы дает информацию о поведении спиновой подсистемы и возникновении макроскопической поляризации и появлении сегнетоэлектрических свойств, вызванных магнитным упорядочением спинов.

В данной главе также исследовалось влияние периодического потенциала подложки на поведение термодинамических параметров квазиодномерного мультиферроика. Исследовался случай небольшого отклонения периода потенциала от межатомного расстояния в цепочке спинов мультиферроика. Несовпадение периода подложки и межатомного расстояния приводит к деформации цепочки спинов, т.е. изменению расстояния между атомами и как следствие к изменению обменных интегралов. Анализ отдельных составляющих энергии системы показал изменение баланса ФМ/АФМ взаимодействий при появлении потенциала подложки. Упругая составляющая энергии также меняет своё поведение при появлении потенциала подложки: в точке фазового перехода появляется максимум вместо минимума. В этой точке смещения спинов от положения равновесия максимальны. Это приводит к увеличению числа магнитных доменов длиной 2 спина, которые вносят вклад в создание микроскопической поляризации, а также доменов с нечетной длиной, которые способствуют созданию противоположно направленной поляризации. В результате макроскопическая поляризация существенно не изменяется.

Несмотря на то, что реальные вещества сложнее построенной модели, полученные результаты могут помочь объяснить некоторые свойства реальных веществ, а именно возникновение сегнетоэлектричества под действием коллинеарного магнитного упорядочения во фрустрированных системах.

Основные результаты главы опубликованы в работах [A5; A2; A6; A7].

## Глава 3. Фазовый переход и магнитоэлектрический эффект в 2D-ферромагнитной пленке на сегнетоэлектрической подложке

Магнитоэлектрические материалы открывают широкие перспективы приложений в области информационных и энергосберегающих технологий. На их основе возможно создание: магнитных сенсоров, ёмкостных электромагнитов, элементов магнитной памяти, невзаимных СВЧ фильтров и других устройств, не предполагающих протекание постоянных электрических токов и сопряженных с этим тепловых потерь [74]. Магнитоэлектрический эффект широко используется в устройствах спинтроники.

### 3.1 Магнитоэлектрический эффект в тонких ферромагнитных плёнках на подложке

Первые предположения о существовании веществ, молекулы которых намагничиваются под действием электрического поля и электризуются под действием магнитного, сделал еще Пьер Кюри [168].

В 1956 году Ландау и Лифшиц [169] предсказывали возможность существования в магнитных кристаллах равновесной электрической поляризации, пропорциональной магнитному полю, и намагниченности, пропорциональной напряженности электрического поля (линейный МЭ эффект). В 1959г. Дзялошинский [170] предсказал существование этого эффекта в  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ , и вскоре Астров экспериментально зафиксировал намагниченность, наведенную электрическим полем [171], а затем В. Фолен и Г. Радо [172] измерили в  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  электрическую поляризацию, наведенную магнитным полем.

Традиционно МЭ эффект в однофазном кристалле описывается теорией Ландау [173; 174] путем записи свободной энергии системы  $F$ , зависящей от приложенного магнитного поля  $\mathbf{h}$ , компоненты которого можно обозначить как  $h_i$ , и электрического поля  $\mathbf{E}$ , компоненты которого можно записать как  $E_i$ . Для неферроика, в котором и поляризация  $P_i(T)$  и намагниченность  $m_i(T)$  равны нулю при отсутствии внешних полей и гистерезиса, свободную энергию

в системе СИ можно записать как

$$-F(\mathbf{E}, \mathbf{h}) = \frac{1}{2}\varepsilon_0\varepsilon_{ij}E_iE_j + \frac{1}{2}\mu_0\mu_{ij}h_ih_j + \alpha_{ij}E_ih_j + \frac{\beta_{ijk}}{2}E_ih_jh_k + \frac{\gamma_{ijk}}{2}h_iE_jE_k \quad (3.1)$$

Первое слагаемое описывает взаимодействие электрической системы с электрическим полем, диэлектрическая проницаемость свободного пространства обозначена как  $\varepsilon_0$ , а относительная диэлектрическая проницаемость представлена в виде тензора второго порядка  $\varepsilon_{ij}(T)$ . Второе слагаемое является магнитным эквивалентом первого, где магнитная проницаемость свободного пространства также обозначено как  $\mu_0$ , а относительная проницаемость как  $\mu_{ij}(T)$ . Третье слагаемое описывает линейный МЭ эффект с коэффициентом  $\alpha_{ij}(T)$ , тензоры третьего ранга  $\beta_{ijk}(T)$  и  $\gamma_{ijk}(T)$  - квадратичные МЭ коэффициенты [71].

В представленном виде все МЭ коэффициенты содержат функции отклика на магнитное и электрическое поля  $\varepsilon_{ij}(T)$  и  $\mu_{ij}(T)$ . МЭ эффект можно легко представить в форме поляризации, зависящей от магнитного поля  $P_i(h_j)$  и намагниченности, зависящей от электрического поля  $m_i(E_j)$ . Дифференцируя выражение для  $F$  по  $E_i$ , получаем выражение (в отсутствии поля  $E_i$ ):

$$P_i = \alpha_{ij}h_j + \frac{\beta_{ijk}}{2}h_jh_k \quad (3.2)$$

и аналогичное выражение для намагниченности:

$$\mu_0m_i = \alpha_{ij}E_j + \frac{\gamma_{ijk}}{2}E_jE_k \quad (3.3)$$

### 3.2 Монте–Карло модель 2D–ферромагнитной пленки на сегнетоэлектрической подложке

При моделировании двумерной ФМ пленки и исследовании её магнитных свойств была использована модель Изинга. Атомы плёнки, расположенные на квадратной решётке с периодом  $a$  (в недеформированном состоянии), характеризуются наличием спина  $S$ , который может принимать два значения ( $1/2$  либо  $-1/2$ ). Гамильтониан такой системы можно записать как:

$$H = - \sum_{i,j} J(r_{i,j})S_iS_j, \quad (3.4)$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между  $i$  и  $j$  атомами.  $J(r_{ij})$  – обменный интеграл. При деформации плёнки, расстояние между ближайшими соседями увеличивается и требуется учитывать это при расчёте обменного интеграла. В общем случае обменный интеграл убывает экспоненциально вместе с расстоянием, поэтому мы можем ограничиться взаимодействием только между ближайшими соседями:

$$J(r_{ij}) = J_0 e^{(-|r_{ij}-a|/r_0)}, \quad (3.5)$$

где  $J_0$  – обменный интеграл недеформированной ФМ пленки. Параметр  $r_0$  определяет степень убывания обменного интеграла с расстоянием и зависит от вещества плёнки. Данная зависимость не учитывает эффекты дальнего действия, присущи некоторым системам, т.к. эффекты дальнего действия подразумевают взаимодействия не только между ближайшими соседями, но и со следующими, что может сказаться на определении критической температуры. Для близкодействующих систем, экспоненциальная зависимость обменного интеграла от расстояния не является универсальной, она может быть и более сложной, однако она является базовой для спиновых моделей.

Влияние подложки на магнитные свойства плёнки проявляется через взаимодействие атомов плёнки и подложки. Атомы подложки на её поверхности оказывают влияние на геометрическое положение атомов плёнки и это влияние зависит от их взаимного расположения. Влияние подложки моделируется с помощью двумерного потенциала с периодически расположенными потенциальными ямами. Здесь ограничимся случаем подложки с квадратной решёткой. Для описания взаимодействия атомов пленки с поверхностью подложки используем двумерный потенциал Френкеля–Конторовой [175].

$$U_{sub} = \frac{\alpha_{FK}}{2} \sum_n \left( 2 - \cos\left(\frac{2\pi x_n}{b_x}\right) - \cos\left(\frac{2\pi y_n}{b_y}\right) \right), \quad (3.6)$$

где  $x_n, y_n$  координаты на поверхности подложки,  $b_x$  и  $b_y$  периоды потенциала подложки вдоль осей  $x$  и  $y$  соответственно (нормированные на  $a$ ),  $\alpha_{FK}$  – амплитуда этого потенциала. В недеформированном состоянии подложка имеет квадратную решётку, соответственно периоды потенциала вдоль осей равны ( $b_x = b_y = b$ ). Внешнее электрическое поле деформирует подложку вдоль вектора напряженности поля. Предположим, что деформация подложки линейно зависит от напряженности электрического поля  $E$  (при малых деформациях). В качестве упрощения, мы направили внешнее электрическое поле вдоль оси  $x$ .

$$b_x = \epsilon b, \quad (3.7)$$

$$1 - \epsilon = \gamma E, \quad (3.8)$$

где  $\epsilon$  – относительная деформация, а  $\gamma$  – сегнетоэлектрическая постоянная, характеризующая конкретное вещество.

В дополнение к взаимодействию с подложкой, в плёнке существует также упругое взаимодействие между атомами. Ограничимся гармоническим приближением:

$$U_{int} = \frac{k}{2} \sum_{n,m} ((x_{n+1,m} - x_{n,m} - a)^2 + (y_{n,m+1} - y_{n,m} - a)^2), \quad (3.9)$$

где  $k$  – упругая постоянная, а  $(x_{n,m}, y_{n,m})$  координаты  $(n, m)$  атома.

Для определения равновесного положения атомов на поверхности подложки необходимо минимизировать полную упругую энергию системы атомов.

$$U = U_{sub} + U_{int} \rightarrow \min, \quad (3.10)$$

$$U = \frac{\alpha_{FK}}{2} \sum_n \left( 2 - \cos\left(\frac{2\pi x_n}{b_x}\right) - \cos\left(\frac{2\pi y_n}{b_y}\right) \right) + \frac{k}{2} \sum_{n,m} ((x_{n+1,m} - x_{n,m} - a)^2 + (y_{n,m+1} - y_{n,m} - a)^2). \quad (3.11)$$

Равновесное положение атомов было найдено при помощи метода Монте Карло. В качестве начального состояния была взята невозмущенная квадратная решётка с периодом  $a$ . Равновесное состояние определялось методом последовательных итераций. В качестве одной итерации выступало пробное смещение каждого атома на случайный вектор, длина которого не превышала  $0.1a$ . Если новое положение атома уменьшало общую энергию системы, то оно принималось. В противном случае, атом оставался на своём месте. В равновесном состоянии новые итерации никак не меняли взаимного расположения атомов.

Расположение атомов пленки на подложке определяется конкурирующими взаимодействиями: между собой и с подложкой. В отсутствие деформации, атомы располагаются в минимумах потенциала подложки. Эти минимумы смещаются от начального положения в зависимости от равновесной деформации подложки. В результате, для некоторых атомов взаимодействие друг с другом является доминирующим, тогда как для других существенную роль играет взаимодействие с подложкой. Это приводит к неравномерным смещениям атомов плёнки относительно начального положения. Неоднородная деформация ФМ

пленки Fe-Ga на однородно деформированной СЭ подложке наблюдалась экспериментально при помощи дифракции рентгеновских лучей [176].

После вычисления равновесного положения атомов проводилось исследование ее магнитных свойств. Намагниченность  $m$  определялась как среднее значение спина на узел.

$$m = \sum_i S_i / N, \quad (3.12)$$

где  $N$  означает общее число атомов плёнки.

Моделирование системы происходило в соответствии с кластерным алгоритмом Вольфа [132]. Для определения температуры фазовых переходов использована теория конечно-размерного масштабирования [102]. Кумулянты Биндера четвертого порядка для различных линейных размеров системы  $L$  определялись как [101]:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (3.13)$$

Угловые скобки обозначают усреднение по термодинамическим состояниям. Температура Кюри определялась из пересечения зависимостей кумулянтов Биндера от температуры для разных размеров системы.

### 3.2.1 Результаты моделирования

С помощью компьютерного моделирования были исследованы системы с линейными размерами  $L$  от 18 до 204. При этом необходимо было выбрать различные наборы  $L$  для различных периодов потенциала  $b$  для соблюдения граничных условий (при  $b \neq a$ ), а именно для того, чтобы на целое число  $L$  атомов плёнки приходилось целое число  $N_p$  минимумов потенциала подложки, то есть  $La = N_p b$ , где  $L$  и  $N_p$  – целые числа. Центральный атом плёнки фиксируется (т.е. остается неподвижным), на систему накладываются периодические граничные условия. Расчет равновесного расположения атомов плёнки занимает 100 000 МК шагов. Затем рассчитывается эволюция магнитной системы: первые 100 000 МК шагов отбрасываются, а термодинамические характеристики рассчитываются в течении следующих 50 000 МК шагов. При расчете эволюции магнитной системы один МК шаг соответствовал попытке перевернуть

выбранный кластер согласно алгоритму Вольфа. Расчет температуры Кюри с помощью кумулянтов Биндера четвертого порядка (3.13) для различных  $L$  показан на рисунке 3.1.

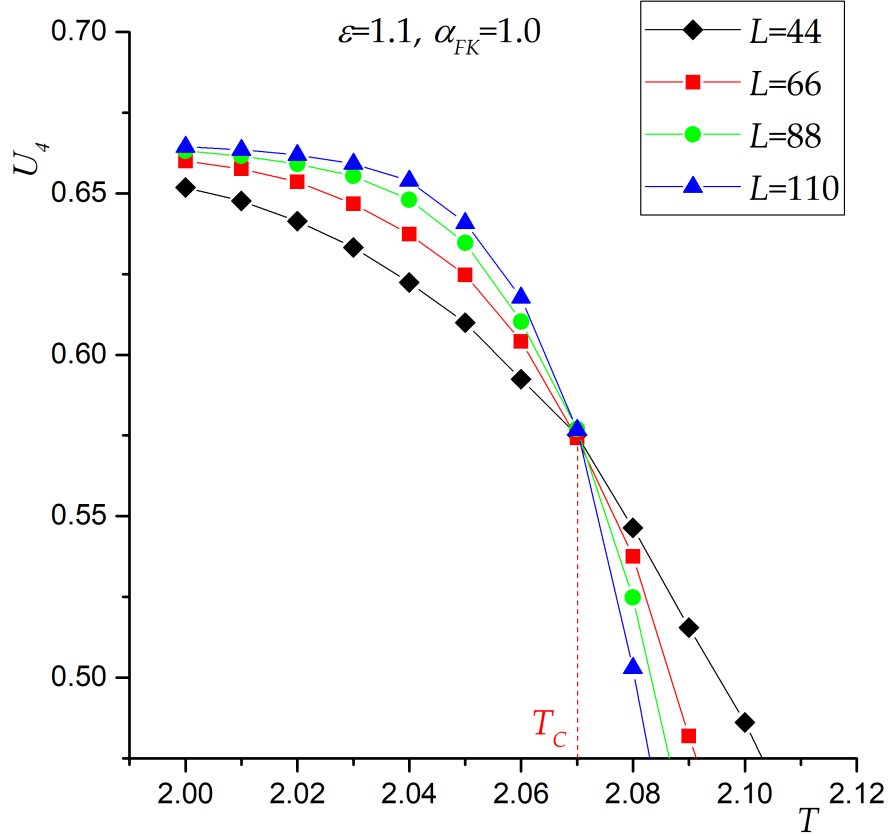


Рисунок 3.1 — Определение температуры Кюри в месте пересечения кумулянтов Биндера 4 порядка для различных размеров системы.

Для упрощения, моделирование проводилось в относительных величинах. В качестве единицы длины было выбрано межатомное расстояние  $a = 1$ . Единичное значение также принято для СЭ постоянной ( $|\gamma| = 1$ ). Другое значение СЭ постоянной приведет к изменениям характерных значений напряженности электрического поля, но основные зависимости не меняются. Вычисления проводились в интервале от  $E = 0$  до  $E = 0.1$ . Сжатие или растяжение подложки зависит от знака величины  $\gamma$ . Значения  $\gamma > 0$  приводит к сжатию подложки и  $E = 1 - \epsilon$ ,  $\gamma < 0$  приводит к растяжению подложки и  $E = \epsilon - 1$ . Для упругой постоянной также было выбрано единичное значение ( $k = 1$ ). Амплитуда потенциала подложки измеряется в единицах упругой постоянной. Вычисления проводились для трех значений:  $\alpha_{FK} = 0.1$ ,  $\alpha_{FK} = 0.5$ ,  $\alpha_{FK} = 1.0$ . График зависимости температуры Кюри от напряженности внешнего электрического поля представлен на рисунке 3.2.

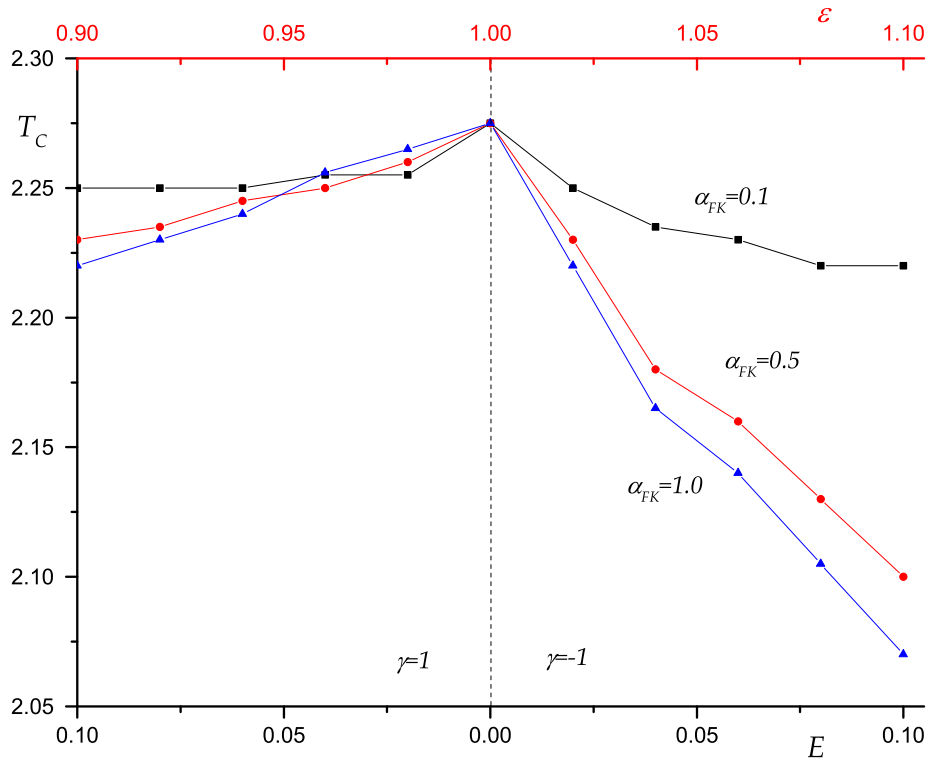
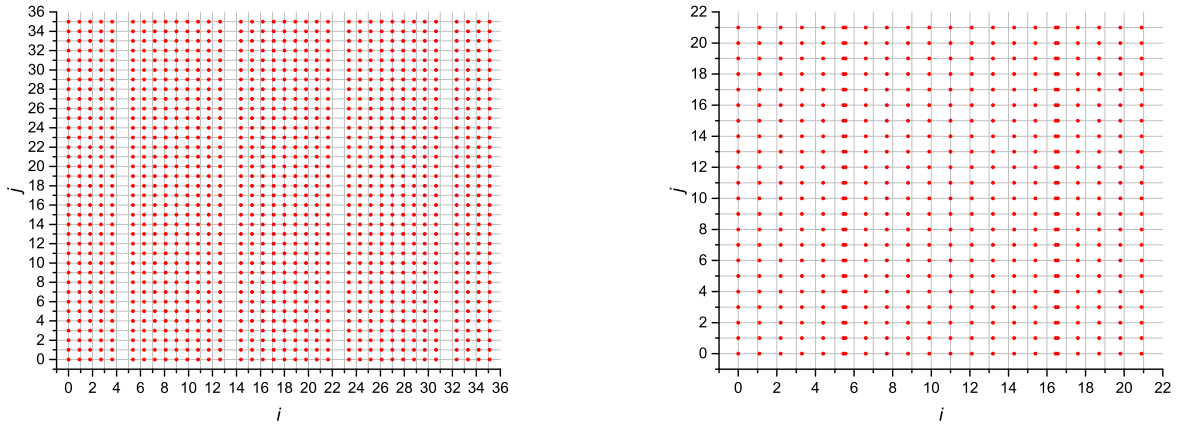


Рисунок 3.2 — Зависимость температуры Кюри от напряженности внешнего электрического поля при различных амплитудах потенциала подложки

Можно заметить, что деформация подложки под воздействием внешнего электрического поля приводит к уменьшению температуры Кюри. Такое поведение зависимости температуры Кюри находится в качественном согласии с экспериментальными данными [65]. Авторы отметили уменьшение температуры фазового перехода с 240 К до 160 К плёнки  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  под действием сжатия СЭ подложки  $\text{BaTiO}_3$  на 1%. При растяжении подложки на 6%, температура Кюри уменьшилась до 195 К. Уменьшение температуры фазового перехода связано с перестройкой кристаллической структуры плёнки. Как при сжатии, так и при растяжении деформация происходит неравномерно (рисунок 3.3).

На рисунке 3.3 можно заметить, что сжатие и растяжение вдоль оси  $x$  приводит к формированию периодической структуры ФМ плёнки. В обоих случаях это происходит в результате конкуренции двух факторов. При сжатии внутри каждой полосы плотность атомов повышается, что приводит к повышению температуры Кюри. Однако между полосами образуются области пониженной концентрации, что приводит к снижению температуры фазового перехода. А при растяжении внутри каждой полосы понижается концентрация атомов, что приводит к снижению температуры Кюри. Одновременно с этим происходит



(а)

(б)

Рисунок 3.3 — Расположение атомов плёнки под действием растяжения (а) и сжатия (б) подложки ( $\alpha_{FK}=1.0$ ). Атомы недеформированной плёнки располагаются на пересечении вертикальных и горизонтальных линий.

наслоение соседних полос, приводящее к повышению концентрации атомов в области перекрытия и повышению температуры фазового перехода. В обоих случаях доминируют факторы, снижающие температуру Кюри, но величина снижения получается разной.

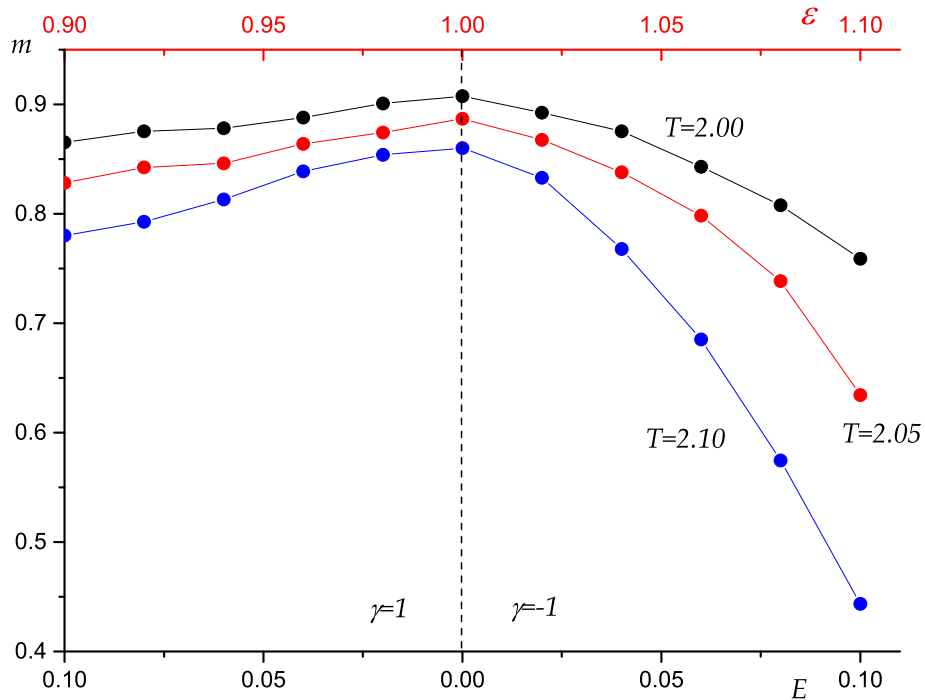


Рисунок 3.4 — Зависимость намагниченности тонкой плёнки от напряженности внешнего электрического поля для  $\alpha_{FK}=1.0$  при температуре ниже точки Кюри

МЭ эффект состоит в изменении намагниченности пленки при помещении системы во внешнее электрическое поле и наблюдается в ферромагнитной фазе. Поэтому система рассматривалась при температурах ниже точки Кюри. На рисунке 3.4 приведена зависимость намагниченности тонкой пленки от напряженности внешнего электрического поля при трех различных температурах.

Намагниченность ФМ плёнки уменьшается во внешнем электрическом поле из-за изменения температуры Кюри. Внешнее электрическое поле при фиксированной температуре приближает систему к точке фазового перехода, что приводит к снижению намагниченности.

### 3.2.2 Теория среднего поля

Построим модель нашей системы в рамках теории среднего поля. Свободная энергия системы может быть записана в виде суммы:

$$F = F_M + F_{DF} + F_{MD} + F_{DS} + F_{SF} + F_{FE}. \quad (3.14)$$

Здесь,  $F_M$  – свободная энергия намагниченности тонкой ФМ плёнки,  $F_{DF}$  – энергия деформации тонкой плёнки,  $F_{MD}$  – энергия магнитострикции,  $F_{DS}$  – энергия деформации СЭ подложки,  $F_{SF}$  – энергия взаимодействия плёнки и подложки,  $F_{FE}$  – энергия взаимодействия СЭ подложки и внешнего электрического поля.

Вблизи точки фазового перехода второго рода свободная энергия намагниченности ферромагнитной пленки может быть записана в виде ряда по степеням намагниченности [177].

$$F_M = Am^2 + Bm^4. \quad (3.15)$$

где  $B$  – положительная постоянная.

$$A = \alpha(T - T_0). \quad (3.16)$$

где  $\alpha$  – положительная постоянная,  $T$  – температура системы,  $T_0$  температура Кюри ФМ плёнки в отсутствии внешнего воздействия.

При однородных деформациях пленки свободная энергия может быть записана в виде:

$$F_{DF} = Cx^2. \quad (3.17)$$

где  $x$  – изменение линейных размеров плёнки,  $C$  – модуль упругости плёнки.

Энергию упругой деформации подложки можно записать аналогичным образом:

$$F_{DS} = Gy^2. \quad (3.18)$$

где  $y$  – изменение линейных размеров подложки, а  $G$  – модуль упругости подложки.

Энергия магнитоупругости для большинства материалов записывается в квадратичной форме:

$$F_{MD} = Dm^2x. \quad (3.19)$$

где  $D$  – положительная постоянная магнитоупругости.

Энергия взаимодействия СЭ подложки с внешним электрическим полем носит линейный характер:

$$F_{FE} = HyE. \quad (3.20)$$

где  $H$  – положительная постоянная.

При малых деформациях подложки, можно учитывать только линейный характер взаимодействия между деформациями плёнки и подложки.

$$F_{SF} = Rxy. \quad (3.21)$$

где  $R$  – положительная постоянная.

Таким образом свободная энергия тонкой ФМ плёнки на СЭ подложке принимает следующий вид:

$$F = Am^2 + Bm^4 + Cx^2 + Dm^2x + Gy^2 + Rxy + HyE. \quad (3.22)$$

Равновесное состояние системы во внешнем электрическом поле описывается следующими условиями:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial m} = 0, \\ \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial F}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3.23)$$

Отсюда получаем систему уравнений для равновесных значений деформаций  $(x, y)$  и намагниченности.

$$\begin{cases} 2Gy + HE + Rx = 0, \\ 2Cx + Dm^2 + Ry = 0, \\ 2Am + 4Bm^3 + 2Dmx = 0. \end{cases} \quad (3.24)$$

Считая, что система находится в ФМ фазе ( $m \neq 0$ ) и решая данную систему уравнений, получим зависимость намагниченности тонкой пленки от напряженности электрического поля, приложенного к подложке.

$$m^2 = \frac{A + DRHE}{D^2 + 2BR^2 - 8BCG}. \quad (3.25)$$

Общий вид зависимости намагниченности от электрического поля имеет вид:

$$m^2 = A' + \beta E. \quad (3.26)$$

Причем  $A' \sim \alpha(T - T_0)$ . Для сравнения этого вывода с результатами компьютерного моделирования был построен график зависимости  $m^2(E)$  при различных температурах (рисунок 3.5).

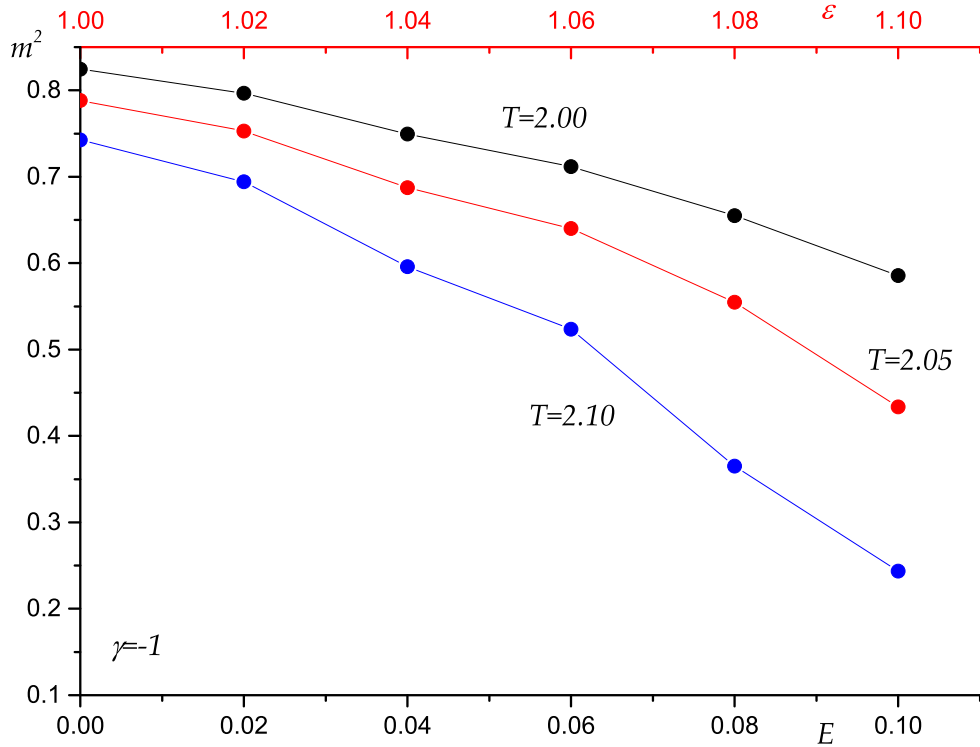


Рисунок 3.5 — Зависимость квадрата намагниченности тонкой пленки от напряженности электрического поля при различных температурах ( $\alpha_{FK} = 1.0$ )

Зависимость  $m^2(E)$  близка к линейной при малых значениях  $E$ . При  $E > 0.06$  зависимость перестаёт быть линейной и приближение теории среднего поля перестаёт работать. Повышение температуры приводит к параллельному смещению графика вдоль оси  $y$ . Общий вид графиков соответствует выводом данной модели на основе теории среднего поля.

Рассмотрим изменение температуры фазового перехода в тонкой пленке под влиянием деформаций подложки во внешнем электрическом поле. Обозначим новую температуру фазового перехода  $T_C$ . В точке фазового перехода намагниченность, как параметр порядка системы, имеет нулевое значение ( $m = 0$ ). Отсюда можем записать уравнение:

$$\alpha(T_C - T_0) + DRHE = 0. \quad (3.27)$$

И температура фазового перехода может быть выражена как:

$$T_C = T_0 - \frac{DRH}{\alpha}E. \quad (3.28)$$

Таким образом, внешнее электрическое поле приводит к снижению температуры Кюри в тонкой пленке на СЭ подложке. Причем уменьшение температуры линейно зависит от напряженности электрического поля. Если сравнить эти результаты с рисунком 3.2, то можно сделать вывод, что теория среднего поля применима также только при слабых полях.

### 3.3 Выводы по главе

Было проведено компьютерное моделирование влияния СЭ подложки на состояние и магнитные свойства 2D ФМ нанопленок. Результаты показывают, что однородные деформации подложки приводят к неоднородным деформациям пленки. Деформации пленки обусловлены взаимодействием между подложкой и атомами пленки. При сжатии подложки происходит образование полосовых структур в пленке. Полосы повышенной плотности разделены полосами с пониженной концентрацией атомов. Растяжение подложки приводит к образованию структур с повышенной концентрацией атомов. Деформации подложки могут быть вызваны нагреванием или внешним электрическим полем. В этом случае можно говорить о структурном фазовом переходе, индуцированном подложкой.

Деформационный обратный магнитоэлектрический эффект в гетероструктуре, состоящей из ФМ плёнки  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  на монокристаллической подложке  $\text{BaTiO}_3$ , исследован в работах [178; 179]. Связь плёнки с подложкой приводит

к прерывистым изменениям намагниченности во внешнем электрическом поле. При электрическом поле 8 кВ/см сдвиг коэрцитивной силы составляет 55%. В статье [180] продемонстрировано изменение намагниченности насыщения ультратонких ФМ плёнок Pd в гетероструктурах Pd/SrTiO<sub>3</sub>/BaTiO<sub>3</sub>, исследованное экспериментально и на основе расчётов из первых принципов. При структурных фазовых переходах в подложке BaTiO<sub>3</sub> намагниченность Pd уменьшается примерно на 5% вследствие деформационного эффекта. Расчёты из первых принципов дают значения 3–4%.

Изменение структуры пленки приводит к изменениям ее магнитных свойств. Под действием деформаций подложки происходит сдвиг температуры Кюри. Она понижается как при сжатии, так и при растяжении подложки. Изменение температуры фазового перехода обусловлено зависимостью обменного интеграла от расстояния между спинами. Снижение температуры Кюри при деформациях подложки объясняется неоднородными изменениями в расположении атомов пленки. Как при растяжении, так и при сжатии наблюдается конкуренция двух факторов. Области повышенной концентрации атомов стремятся повысить температуру Кюри, тогда как области пониженной концентрации атомов понижают её. Эти тенденции связаны с линейной зависимостью температуры фазового перехода от значения обменного интеграла. Доминирование областей с пониженной концентрацией атомов обусловлено экспоненциальным законом убывания обменного интеграла с расстоянием. Эффекты дальнего действия могут существенно изменить зависимость температуры Кюри от деформаций подложки.

Основные результаты главы опубликованы в работе [А3].

## Глава 4. Исследование влияния подложки на критическое поведение двухмерного ферромагнетика

Как хорошо известно, температура ФМ фазового перехода определяется значением обменного интеграла материала, который сильно зависит от расстояния между атомами. Влияние подложки может приводить к растяжению или сжатию ФМ плёнки. В частности, материалы подложки и ФМ плёнки могут обладать различными коэффициентами теплового расширения. Нагревание системы будет приводить к дополнительным деформациям и смещению точки Кюри. Это явление получило название фазового перехода, индуцированного подложкой.

Экспериментально такие фазовые переходы наблюдались для тонких плёнок MnAs на немагнитной подложке [181—183]. В этих экспериментах подложка обладает кристаллической решёткой, отличной от плёнки, и задаёт ограничения на размер плёнки, создавая дополнительные упругие напряжения. В статье [184] экспериментально показано, что деформация растяжения ФМ плёнки MnAs, составляющая 0.5%, приводит к смещению точки Кюри на 50 К.

В настоящей главе проведено исследования влияния подложки на критическое поведение ФМ монослойной плёнки. При моделировании ФМ плёнки была использована модель Изинга, а влияние подложки моделировалось при помощи двумерного периодического потенциала. В результате были получены зависимости температуры Кюри и критических индексов от периода потенциала подложки при различной амплитуде потенциала. Моделирование было выполнено с помощью кластерного алгоритма Вольфа.

### 4.1 Постановка задачи

При компьютерном моделировании тонкой плёнки была использована модель Изинга на квадратной решётке с периодом  $a_0$ . Потенциальная энергия взаимодействия атомов плёнки в гармоническом приближении и при малости деформаций относительно  $a_0$  будет иметь вид (3.9). Влияние подложки также описывается в виде двумерного периодического потенциала Френкеля-Конторо-

вой (3.6). Однако в отличие от главы 3, в которой внешнее электрическое поле было направлено вдоль оси  $x$  и фактически подложка деформировалась только вдоль оси  $x$ , в данной главе рассматривается изменение периода потенциала по осям  $x$  и  $y$ . Общая потенциальная энергия системы также представлена в виде суммы энергий взаимодействия атомов плёнки и периодического потенциала подложки. На рисунке 4.1 схематично показаны магнитные спины атомов плёнки, связанные между собой упругим взаимодействием и находящиеся в двумерном периодическом потенциале подложки.

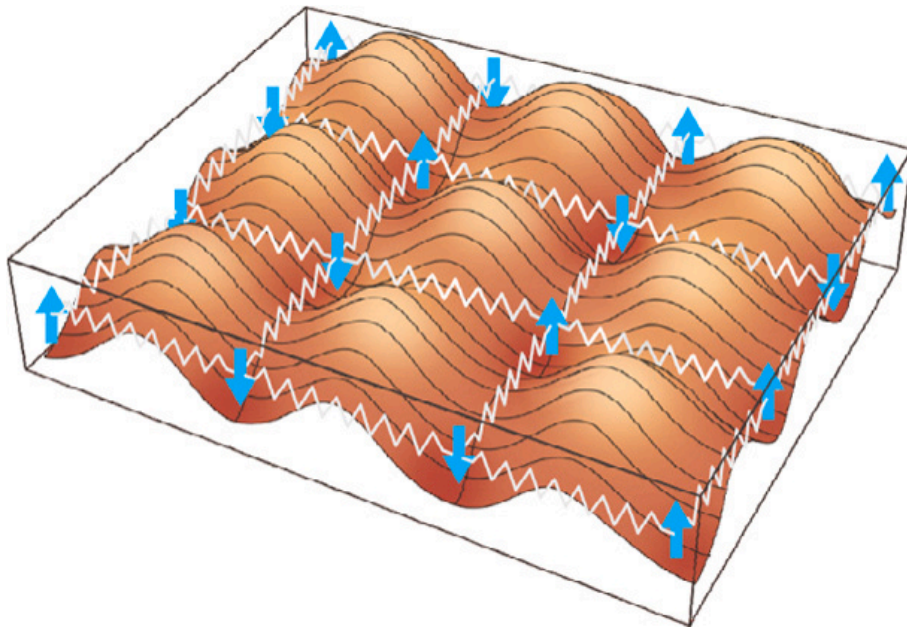


Рисунок 4.1 — Схема квадратной решетки Изинга на подложке, смоделированной двумерным потенциалом Френкеля-Конторовой. Стрелками обозначены отдельные спины, зигзагом обозначено упругое взаимодействие между соседними атомами.

Если период невозмущённой решётки спинов совпадает с периодом подложки, то атомы размещаются в минимумах потенциала и деформации решётки не происходит. Температура Кюри и критические индексы системы остаются неизменными. При несовпадающих периодах происходит деформация решётки. В дальнейшем ограничимся случаем, когда различие периодов не превышает 10%. Деформация решётки приводит к изменению расстояния между атомами. В результате изменяется обменный интеграл взаимодействия спинов атомов. Гамильтониан двумерной модели Изинга представлен в виде (3.4). Полная энергия системы запишется следующим образом:

$$\begin{aligned}
H = & - \sum_{i,j} J(r_{i,j}) S_i S_j + \frac{k}{2} \sum_{i,j} ((x_{i+1,j} - x_{i,j} - a)^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j} - a)^2) \\
& - \frac{\alpha_{FK}}{2} \sum_n \left( \cos \left( \frac{2\pi x_n}{b_x} \right) + \cos \left( \frac{2\pi y_n}{b_y} \right) - 2 \right).
\end{aligned} \tag{4.1}$$

В зависимости обменного интеграла от расстояния между атомами пленки используем линейное приближение:

$$J(r_{ij}) = J_0 - \varphi(((x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2)^{1/2} - a_0). \tag{4.2}$$

Здесь  $J_0$  — обменный интеграл взаимодействия спинов исходной недеформированной плёнки. Коэффициент  $\varphi$  показывает скорость убывания обменного интеграла с расстоянием.

Компьютерное моделирование будем проводить с помощью кластерного алгоритма Вольфа [132]. Температура фазового перехода  $T_C$  определялась с помощью гипотезы подобия как точка пересечения кумулянтов Биндера четвертого порядка для систем с различными линейными размерами (выражение (3.13)). В качестве параметра порядка выбрана намагниченность плёнки, определяемая в выражении (3.12).

Для определения соотношения критических индексов  $-\gamma/\nu$  была рассчитана магнитная восприимчивость из флуктуационных соотношений [185]:

$$\chi = NK \left( \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), \tag{4.3}$$

где  $K = |J_0|/(k_B T)$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана. В критической области восприимчивость удовлетворяет соотношению  $\chi \sim L^{-\gamma/\nu}$ . Критический индекс  $\nu$  может быть вычислен из соотношения:

$$\frac{dU}{dT} \sim L^{-1/\nu}. \tag{4.4}$$

Другие критические индексы могут быть определены из скейлинговых соотношений:

$$\eta = 2 - \gamma/\nu, \quad \beta = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta), \quad \alpha = 2 - d\nu. \tag{4.5}$$

Размерность системы  $d$  в нашем случае равна 2.

На рисунке 4.2 приведен пример определения критических индексов  $\gamma/\nu$  с помощью скейлингового выражения (1.19). На нём изображены значения

восприимчивости в логарифмическом масштабе при температуре  $T_C$  для различных размеров исследуемой решётки. Линеаризация этих данных методом наименьших квадратов даёт искомое значение критических индексов как тангенс угла наклона полученной прямой.

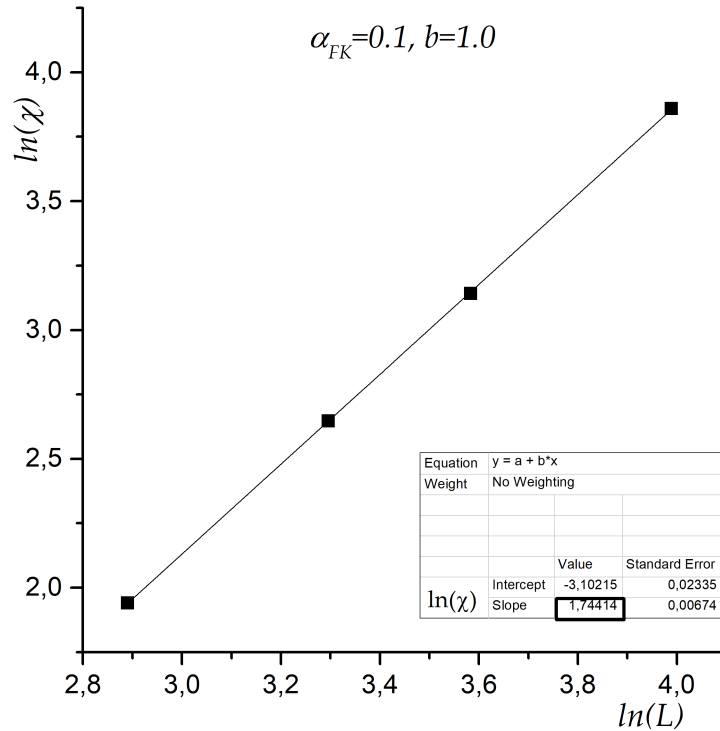


Рисунок 4.2 — Определение критических индексов  $\gamma/\nu$  с помощью теории конечно-размерного скейлинга. Полученное значение выделено темной рамкой.

Перед исследованием критических явлений мы должны определить основное состояние кристаллической решётки плёнки. Для этого осуществлялся поиск минимума потенциальной энергии системы:  $U = U_{int} + U_{sub} \rightarrow min$ . Данная процедура была описана в главе 3.

При несовпадении периода невозмущённой плёнки и подложки ( $a_0 \neq b$ ) большое значение имеет выбор граничных условий. Этот вопрос также усложняется необходимостью согласования алгоритма поиска основного состояния и последующего применения алгоритма Вольфа. Если крайние атомы закреплены на границе подложки, а коэффициент покрытия равен единице, то остальные атомы размещаются в минимумах потенциальной энергии подложки [186–190]. Происходит линейное увеличение или уменьшение кристаллической решётки. Этот случай легко описывается без использования компьютерного моделирования.

2D модель Изинга с постоянным обменным интегралом принадлежит к классу точно решаемых моделей [18]. Температура фазового перехода пропорциональна величине обменного интеграла:

$$T_C = \frac{2J(a)}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269J(a)/k_B, \quad (4.6)$$

где  $k_B$ -постоянная Больцмана,  $a$  - расстояние между атомами.

Для учета влияния подложки можно разложить обменный интеграл в ряд по малому параметру  $\sigma$ .

$$J(a) = J(a_0 + \sigma a_0) = J_0 + \varphi\sigma, \quad \varphi = a_0 \left. \frac{dJ(a)}{da} \right|_{a=a_0}. \quad (4.7)$$

Учитывая это, температуру фазового перехода можно записать в виде:

$$T_C = 2.269J(a)/k_B = 2.269J_0/k_B + 2.269\sigma\varphi/k_B = T_0 + \Delta T. \quad (4.8)$$

Влияние подложки приводит к сдвигу температуры фазового перехода, который зависит от разности периода потенциала подложки и межатомного расстояния невозмущенной плёнки:

$$\Delta T = 2.269 \frac{\varphi(b - a_0)}{k_B a_0}. \quad (4.9)$$

Таким образом критическая температура изменяется линейно, пропорционально изменению размеров плёнки. Следует также заметить, что смещение  $T_C$  может быть как положительным, так и отрицательным. Критические индексы остаются неизменными.

Интерес представляют системы со свободными границами [189; 190]. Для обеспечения свободных границ в двумерной системе производилась фиксация положения одного атома в центре системы с координатами  $(x_0 = L/2; y_0 = L/2)$ . Положение подложки выбиралось таким образом, чтобы этот атом располагался в минимуме потенциала. Положение остальных атомов в основном состоянии определялось из условия минимума потенциальной энергии.

## 4.2 Компьютерный эксперимент

При постановке компьютерного эксперимента было выбрано значение  $J_0 = 1$ . В этом случае температура  $T$  и скорость убывания обменного интеграла с расстоянием измеряются в относительных единицах, пропорциональных  $J_0$ . Также было выбрано значение  $\varphi = 1$ . Данный параметр влияет на угол наклона кривой зависимости критической температуры. Увеличение или уменьшение значения  $\varphi$  приводит к пропорциональному изменению угла наклона, не влияя на общий вид зависимости. Для периода недеформированной кристаллической решётки плёнки использовалось значение  $a_0 = 1$ , так как оно является характерным масштабом системы. Остальные геометрические параметры системы измеряются в единицах  $a_0$ . По аналогичным причинам использовалось значение  $k = 1$ . Компьютерный эксперимент проводился с двумя относительными значениями амплитуды потенциала подложки  $\alpha_{FK} = 0.01$  и  $\alpha_{FK} = 0.1$ . Период потенциала подложки принимал значения от  $b = 0.9$  до  $b = 1.1$  с шагом  $\Delta b = 0.01$ . Размер системы изменялся от  $L = 20$  до  $L = 50$  с шагом  $\Delta L = 10$ .

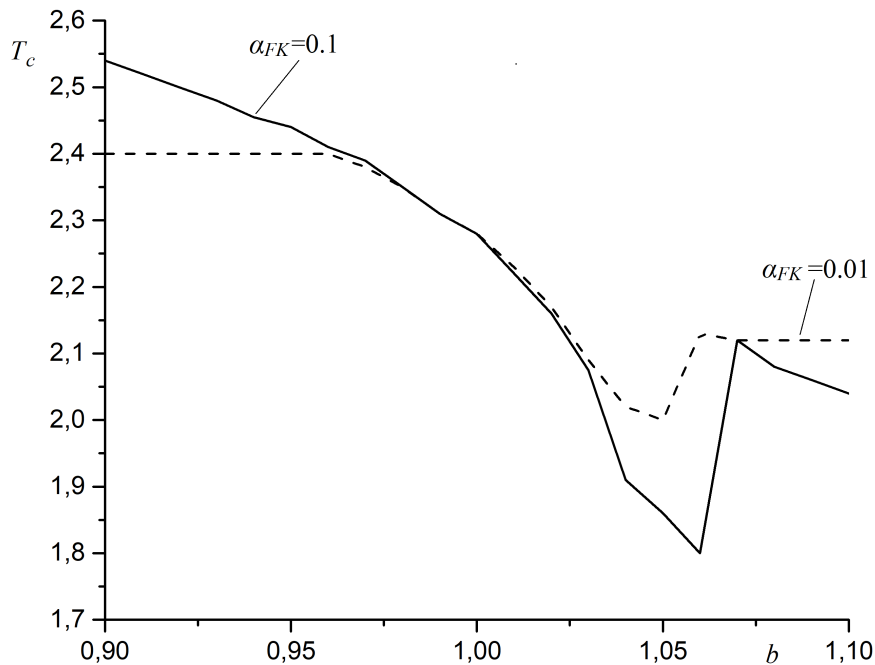


Рисунок 4.3 — Зависимость температуры фазового перехода в плёнке  $T_C$  от периода потенциала подложки  $b$  при двух значениях амплитуды потенциала подложки (сплошная линия —  $\alpha_{FK} = 0.1$ , пунктирная линия —  $\alpha_{FK} = 0.01$ )

На рисунке 4.3 представлена зависимость температуры фазового перехода в плёнке  $T_C$  от периода потенциала подложки  $b$  при значениях амплитуды потенциала  $\alpha_{FK} = 0.01$  и  $\alpha_{FK} = 0.1$ .

Как и следовало ожидать, оба параметра подложки (амплитуда и период) оказывают влияние на фазовый переход в ФМ плёнке. При уменьшении периода подложки ( $b < 1$ ) происходит уменьшение постоянной решётки плёнки. Вследствие этого уменьшается расстояние между спинами и увеличивается значение обменного интеграла, которое приводит к росту температуры Кюри. Упругое взаимодействие между атомами препятствует сжатию, и атомы находятся не в минимумах потенциала подложки, поэтому изменение температуры фазового перехода носит нелинейный характер. На рисунке 4.3 видно, что чем выше амплитуда потенциала подложки, тем кривая температуры Кюри ближе к прямой. При деформациях сжатия, соответствующих  $b < 0.95$  и низкой амплитуде потенциала подложки, температура фазового перехода выходит на постоянное значение. Упругие силы кристаллической решётки препятствуют дальнейшему сжатию.

Аналогичная картина наблюдается и при малых деформациях растяжения. При деформациях, возникающих в связи с увеличением периода потенциала меньше чем на 5% происходит простое растяжение решётки, сопровождающееся уменьшением температуры Кюри. Как и в случае сжатия, величина деформации зависит от амплитуды потенциала подложки. Однако при растяжении, соответствующем некоторому критическому значению периода  $b_c$  ( $b > b_c$ ), происходит резкий скачок температуры фазового перехода с дальнейшим её плавным уменьшением. Для  $\alpha_{FK} = 0.1$  критическое значение  $b_c = 1.06$ , для  $\alpha_{FK} = 0.01$  критическое значение  $b_c = 1.05$ . Как показал анализ конфигурации размещения атомов, при  $b > b_c$  происходит перестройка кристаллической решётки плёнки, то есть в системе наблюдается структурный фазовый переход. Точка  $b = b_c$  является тройной: в ней происходит пересечение линии структурного фазового перехода с линией ФМ фазового перехода. Причём изменение кристаллической решётки происходит скачкообразно, что говорит о фазовом переходе первого рода. Изменение геометрии системы также подтверждается зависимостью отношения критических индексов  $\gamma/\nu$  от периода потенциала подложки, приведённой на рисунке 4.4.

Для отношения критических индексов  $\gamma/\nu$  наблюдается ступенчатое изменение при  $b > b_c$ . Происходит перестройка системы, которая переводит её

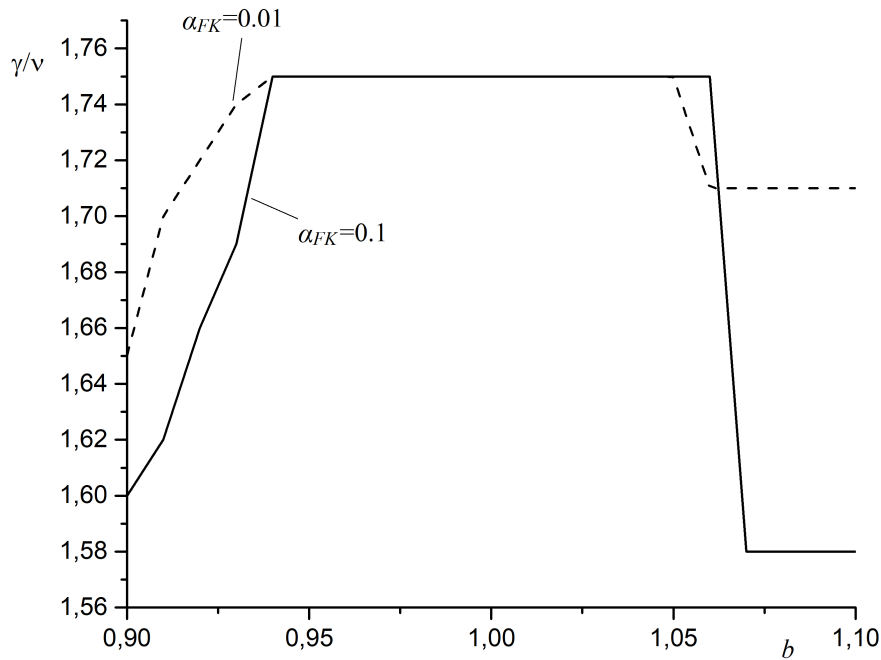


Рисунок 4.4 — Зависимость отношения критических индексов  $\gamma/\nu$  от периода потенциала подложки  $b$  при различных значениях амплитуды потенциала  $\alpha_{FK}$  (сплошная линия —  $\alpha_{FK} = 0.1$ , пунктирная линия —  $\alpha_{FK} = 0.01$ )

в новый класс универсальности критического поведения. Однако из графика изменения отношения критических индексов видно, что изменение класса универсальности также происходит при  $b < 0.95$  и сопровождается не скачкообразным изменением критической температуры, а плавным изменением критических индексов. Отсюда можно сделать вывод, что при деформации сжатия, соответствующей уменьшению периода потенциала подложки на 5%, также происходит структурный фазовый переход. Однако этот переход является переходом 2 рода и происходит в виде непрерывного изменения кристаллической структуры.

### 4.3 Выводы по главе

Компьютерное моделирование показало, что изменение состояния подложки приводит к деформации кристаллической решётки плёнки, изменяющей её магнитное поведение. При малых деформациях плёнки, вызванных влиянием подложки, происходит простое увеличение элементарной ячейки, что приводит

к линейному изменению температуры Кюри. Критические индексы системы остаются неизменными. Практически все экспериментальные работы исследуют именно этот режим. Так, в статье [191] исследуются ФМ плёнки NiO на ориентированной сегнетоэлектрической монокристаллической подложке. Показано, что изменение температуры системы на 50 К приводит к изменению намагниченности на 15%. В работе [192] проведено исследование ФМ плёнки  $\text{LaCoO}_{3-\delta}$  на различных подложках, обеспечивающих её деформацию (от 1.4% сжатия до 2.5% растяжения). Показано, что при растяжении плёнки она переходит в ФМ состояние при температуре 80–85 К, что не совпадает с точкой Кюри для недеформированной плёнки. В статье [193] исследованы управляемые деформации в тонких плёнках  $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$  на подложках  $\text{La}_{0.18}\text{Sr}_{0.82}$  и  $\text{SrTiO}_3$ . Деформации вызваны несоответствием решёток плёнки и подложки. Плёнка, осаждённая на  $\text{SrTiO}_3$ , демонстрирует деформации растяжения 1.3%, что приводит к понижению температуры Кюри до 210 К. Снижение температуры фазового перехода наблюдается также на подложке  $\text{La}_{0.18}\text{Sr}_{0.82}$ , вызывающей неизотропные деформации. В статье [194] исследованы магнитные свойства плёнок магнетита  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , выращенных на подложках  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ,  $\text{MgGa}_2\text{O}_4$  и  $\text{CoGa}_2\text{O}_4$  с различной степенью рассогласования решёток (3.8%, -1.4% и -0.8% соответственно). Подложки индуцируют упругие напряжения в плёнке, что приводит к значительному изменению её магнитных свойств.

Как показали исследования, результаты которых приведены в этой главе, если периоды решётки плёнки и подложки отличаются более чем на 5%, то существенно меняется характер поведения намагниченности плёнки. Это связано с перестройкой кристаллической решётки плёнки. Происходит структурный фазовый переход и изменяется класс универсальности, к которому относится ФМ плёнка. Это изменение сказывается как на температуре Кюри, так и на критических индексах. Точка на фазовой диаграмме, соответствующая отклонению периода плёнки и подложки на 5%, по-видимому, является тройной точкой пересечения ФМ и структурного фазовых переходов в тонкой плёнке.

Основные результаты главы опубликованы в работах [A1; A4].

## Глава 5. Влияние магнитного поля и температуры на магнитную структуру 2D-магнетика на подложке

Интерес к исследованию свойств наноструктур на основе 2D-магнитных материалов обусловлен широкой перспективой их применения в качестве электронных устройств спинтроники. 2D-магнетики делают возможным создание нового типа энергонезависимой памяти с более высокой плотностью записи. В качестве единицы информации в такой памяти могут выступать топологически защищенные вихреобразные спиновые структуры - скирмионы.

### 5.1 Магнитные скирмионы

Сам термин появился в честь Тони Скирми, предложившего такую модель существования стабильных частиц [195] на примере адронов в ядерной физике. Вскоре выяснилось, что такая модель хорошо подходит и для физики конденсированного состояния в части описания жидких кристаллов, Бозе конденсата и квантового эффекта Холла.

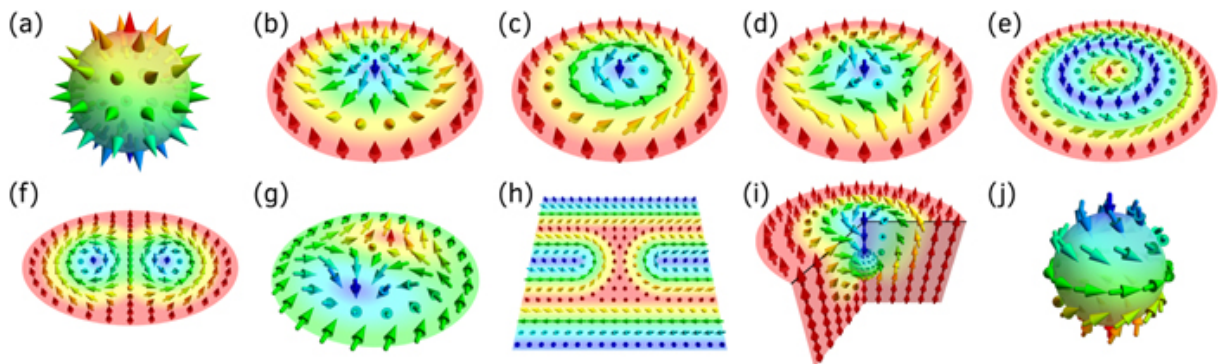


Рисунок 5.1 — Примеры различных топологических спиновых структур: (a) - хеджехог (Hedgehog), (b) - скирмион Неелевского типа, (c) - скирмион Блоховского типа, (d) - антискирмион, (e) - скирмиониум, (f) - бискирмион, (g) - скирмион в плоскости, (h) - скирмион в геликоидальном окружении, (i) - хиральный поплавок, (j) - причесанный анти-хеджехог из (i) [196].

После появления теории Скирми было предсказано также существование топологически защищенных спиновых структур в хиральных магнетиках, кото-

рые можно назвать магнитными скирмионами. Позже это предположение было подтверждено и для объёмных структур и для тонких пленок и для монослоёв. После этого было обнаружено большое количество новых топологических магнитных структур, часть из которых схематически изображена на рисунке 5.1.

Топологическая защищенность скирмионных состояний обуславливается неизменностью скирмионного числа. Скирмионное число  $N_{sk}$  определяет сколько раз направление спина  $\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \mathbf{S}(x,y)$  оборачивается вокруг единичной сферы [197; 198]:

$$N_{sk} = \frac{1}{4\pi} \int \int d^2\mathbf{r} \mathbf{S} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial y} \right) \quad (5.1)$$

Механизмы образования магнитных скирмионов [199]:

1. Дальнодействующее диполь-дипольное взаимодействие в тонких магнитных пленках с анизотропией типа легкой оси, направленной вне плоскости. Диполь-дипольное взаимодействие способствует намагничиванию в плоскости, тогда как анизотропия способствует намагничиванию вне плоскости. В результате конкуренции между двумя взаимодействиями возникает периодические полосы, в которых намагниченность вращается в плоскости, перпендикулярной плёнке. Приложенное поле, перпендикулярное плёнке создаёт из такой структуры массив магнитных скирмионов и пузырьков.

В этом случае размер скирмионов составляет обычно от 100нм до 1мкм, что сравнимо с периодом спирали, определяемым отношением величин диполь-дипольного и обменного взаимодействий.

2. Взаимодействие Дзялошинского-Мория (ДМ). Оно проявляется в нецентросимметричных кристаллах, таких как MnSi,  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ , FeGa,  $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ . В этом случае под действием внешнего магнитного поля происходит превращение из геликоидальной спиральной структуры в скирмионы с треугольной решеткой.

Размер скирмионов составляет 5-100нм.

3. Фрустрированное обменное взаимодействие и
4. Четырех-спиновое обменное взаимодействие могут приводить к скирмионным структурам атомарного размера (около 1нм).

Одними из многих материалов, в которых возможно образование магнитных скирмионов, являются кубические нецентросимметричные магнетики. В

них может присутствовать неколлинеарные спиновые конфигурации, которые могут состоять из одной или нескольких спиралей, тем самым образуя скирмионы. В континуальном приближении антисимметричное ДМ взаимодействие описывается Гамильтонианом [200; 201]:

$$H = \int dr \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{S})^2 + D \mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{S}) - \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \right] \quad (5.2)$$

где  $\mathbf{B}$  - внешнее магнитное поле. Основное состояние, описываемое выражением (5.2) является геликоидальное с волновым вектором, величина которого  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda = D/J$ . Когда величина  $D/J$  мала, континуальное приближение справедливо, а спины направлены перпендикулярно вектору  $\mathbf{k}$ .

Силицид марганца (MnSi) со структурой B20 является примером геликоидального магнетика с  $|\mathbf{k}| = 0.043 \text{ \AA}^{-1}$ . На рисунке 5.2 представлена фазовая диаграмма MnSi, полученная из эксперимента по рассеянию нейтронов [202]. На нем видна двумерная скирмионная фаза (A-фаза). Эта фаза может быть представлена как гибридное состояние, состоящее из трёх спиралей с волновыми векторами, формирующими между собой угол  $120^\circ$ .

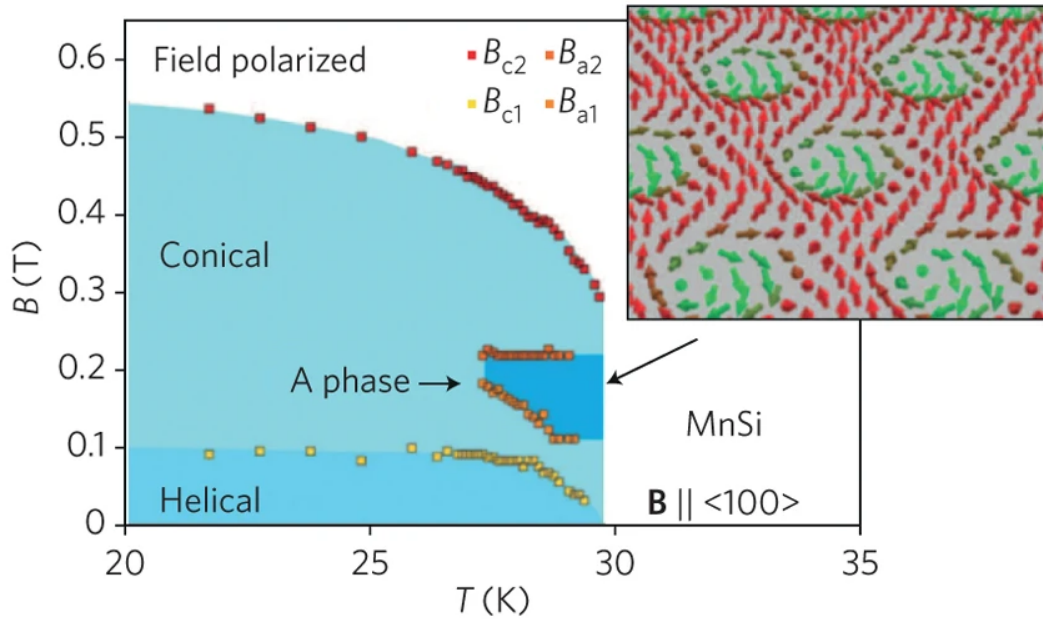


Рисунок 5.2 — Фазовая диаграмма для MnSi. На вставке изображен схематический вид скирмионов в треугольном кристалле, соответствующий «фазе А».  $B_{a1}$ ,  $B_{a2}$ ,  $B_{c1}$ ,  $B_{c2}$  критические значения магнитного поля на границах фаз [202].

## 5.2 Монте-Карло модель кубического нецентросимметричного 2D-магнетика

В настоящей главе изучается 3D-модель Гейзенберга на квадратной 2D-решетке. Взаимодействие Дзялошинского-Мория лежит в плоскости  $(x, y)$  для получения спиральной конфигурации спинов, внешнее магнитное поле приложено вдоль оси  $z$ . Гамильтониан такой модели будет выглядеть следующим образом [203]:

$$\begin{aligned}
 H = & -D \sum_{i,j} ((\mathbf{S}_{i,j} \times \mathbf{S}_{i,j+1})^x + (\mathbf{S}_{i,j} \times \mathbf{S}_{i+1,j})^y) \\
 & - J \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \cdot (\mathbf{S}_{i,j+1} + \mathbf{S}_{i+1,j}) + A_1 \sum_{i,j} \left( (S_{i,j}^x)^4 + (S_{i,j}^y)^4 + (S_{i,j}^z)^4 \right) \\
 & - A_2 \sum_{i,j} (S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i+1,j}^y) - h \sum_{i,j} S_{i,j}^z,
 \end{aligned} \quad (5.3)$$

где  $J$  – обменный интеграл ФМ взаимодействия,  $D$  – взаимодействие Дзялошинского-Мория,  $A_1$  и  $A_2$  – постоянные анизотропии (было принято  $A_1 = 0.5$ ),  $h$  – внешнее магнитное поле. Увеличение индексов  $i, j$  соответствует движению вдоль осей  $y$  и  $x$ . Моделирование выполнялось на решётке размером  $18 \times 18$ , поэтому отношение  $D/J$  было выбрано равным  $\sqrt{6}$ , что дает значение волнового вектора  $k = 2\pi/6$ , позволяющее разместить на решетке несколько периодов спирали. Для упрощения моделирования, постоянная решетки, как и постоянная Больцмана были выбраны равными единице. При моделировании был использован стандартный алгоритм Метрополиса. Первые  $2 \times 10^6$  МК шагов на спин для каждой температуры отбрасывались, термодинамические параметры рассчитывались в течении следующих  $2 \times 10^6$  МК шагов на спин.

Для анализа полученных конфигураций магнитной системы использовалось Фурье преобразование  $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  усреднённой спиновой конфигурации  $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle$ . Для определения типа полученной конфигурации строился профиль интенсивностей  $|\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$  в плоскости  $(k_x, k_y)$ .

Варьируя параметры анизотропии и внешнего поля можно добиться нескольких видов спиновых конфигураций. Фазовая диаграмма данной системы при низкой температуре ( $T = 0.01$ ) представлена на рисунке 5.3 [203]. Фазовое пространство при заданных параметрах делится на несколько фаз:  $SS$

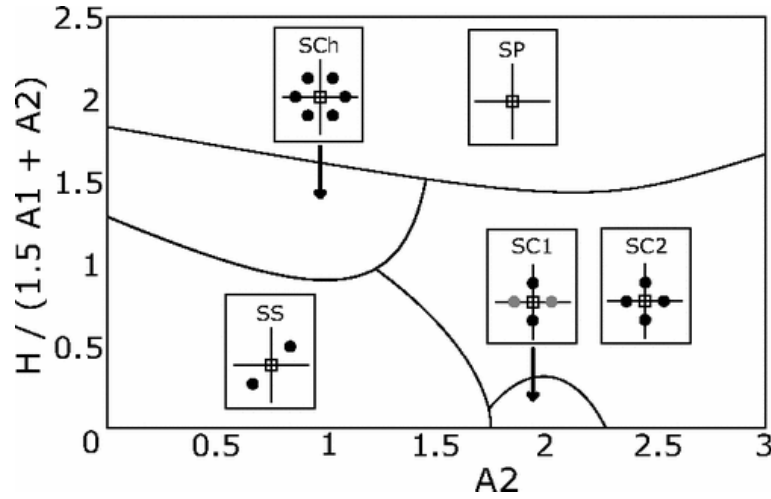


Рисунок 5.3 — Фазовая диаграмма модулируемой системы, описываемой выражением (5.3) при низкой температуре ( $T = 0.01$ ) [203]. Возле каждой фазы схематически показан соответствующий профиль интенсивностей  $|\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$ .

– спиральная фаза (*spiral spin*),  $SP$  – ФМ фаза (*spin polarization*),  $SC$  – скирмионный кристалл. Фаза  $SC$  подразделяется на  $SC_1$  – пики интенсивности имеют разную амплитуду,  $SC_2$  – пики интенсивности имеют одинаковую амплитуду и  $SC_h$  – шестиугольный профиль интенсивностей.

В данной главе исследована только скирмионная фаза  $SC$ . Усредненные спиновые конфигурации и профили интенсивностей для фаз  $SC_1$ ,  $SC_2$ ,  $SC_h$  при  $T = 0.01$  изображены на рисунке 5.4.

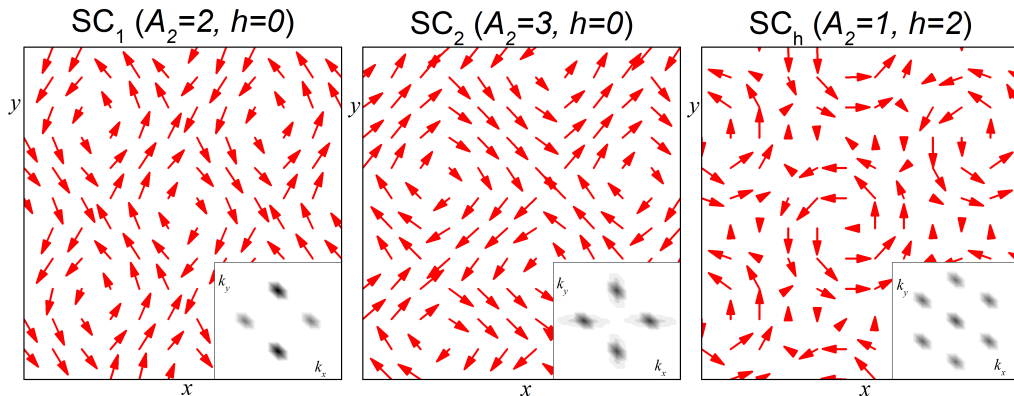


Рисунок 5.4 — Спиновая конфигурация и профиль интенсивностей  $|\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$  для скирмионных фаз при низкой температуре ( $T = 0.01$ ). Стрелками обозначены направления спинов в плоскости  $(x, y)$ .

Фаза  $SC_1$  и  $SC_2$  образуются в результате суперпозиции двух спиралей спинов ( $[10]$  и  $[01]$ ), о чем наглядно свидетельствует их профиль интенсивности. При этом видно, что интенсивность одной из спиновых спиралей в  $SC_1$

заметно меньше другой. Фаза  $SC_h$  промодулирована в трёх направлениях, отстоящих друг от друга на  $120^\circ$ . Профиль интенсивности для фазы  $SC_h$  имеет шестиугольную форму.

Влияние магнитного поля на исследуемую систему показано на рисунке 5.5. На нем представлены зависимости намагниченности и хиральности от внешнего магнитного поля при низкой температуре ( $T = 0.01$ ). Однородная хиральность  $\Upsilon$  рассчитывалась по формуле:

$$8\pi\Upsilon_{i,j} = \mathbf{S}_{i,j} \cdot (\mathbf{S}_{i,j+1} \times \mathbf{S}_{i+1,j}) + \mathbf{S}_{i,j} \cdot (\mathbf{S}_{i,j-1} \times \mathbf{S}_{i-1,j}), \quad (5.4)$$

$$\Upsilon = \sum_{i,j} \Upsilon_{i,j}$$

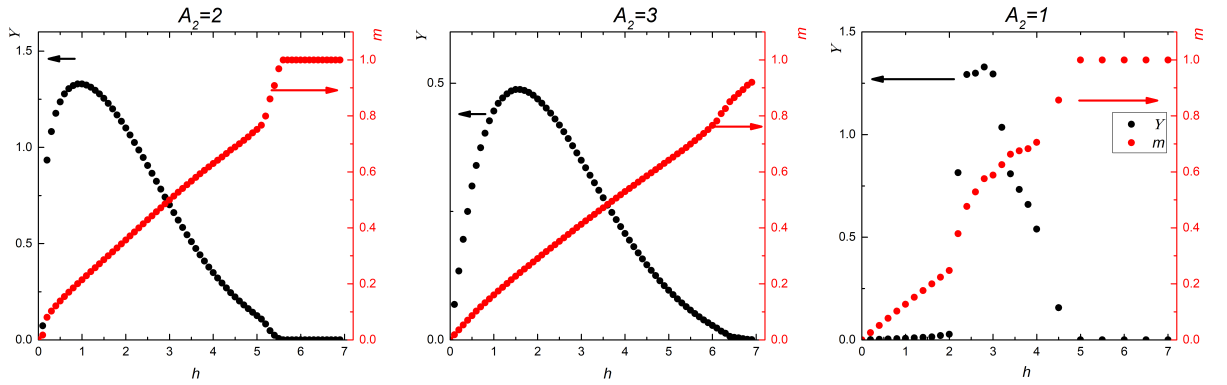


Рисунок 5.5 — Зависимость намагниченности  $m$  и хиральности  $\Upsilon$  от внешнего магнитного поля  $h$  для различных значений параметра  $A_2$  ( $T = 0.01$ ).

В отсутствие внешнего магнитного поля  $\Upsilon = 0$  для  $A_2 = 2$  и  $A_2 = 3$  и система находится в фазе  $SC_1$  и  $SC_2$  соответственно, однако при включении внешнего поля хиральность сразу становится ненулевой. Зависимость  $\Upsilon(T)$  для  $A_2 = 1$  имеет иной характер: в отсутствие внешнего поля система находится в фазе  $SS$ , характеризующаяся спиральным упорядочением спинов в направлении  $[11]$  плоскости  $(x,y)$ , а хиральность резко увеличивается только при поле  $h > 2$ . В этот момент наблюдается переход из спиральной фазы  $SS$  в скирмионную  $SC_h$  (рис. 5.6). Из полученной зависимости видно, что система переходит в ФМ фазу при значениях магнитного поля выше 5 для  $A_2 = 2$ ,  $A_2 = 1$  и выше 7 для  $A_2 = 3$ .

Изменение локальной хиральности при увеличении магнитного поля схематически обозначено на рисунке 5.6. При  $h = 0$  для фаз  $SC_1$  и  $SC_2$  отчетливо видны области формирования скирмионов (светлые участки) и антискирмионов (темные участки). С повышением магнитного поля периодическая структура

разрушается, и появляются одиночные скирмионы. На рисунке также отчетливо видно, как с повышением магнитного поля спиральная фаза  $SS$  переходит в скирмионную  $SC_h$ , но при дальнейшем увеличении поля одиночные скирмионы не появляются.

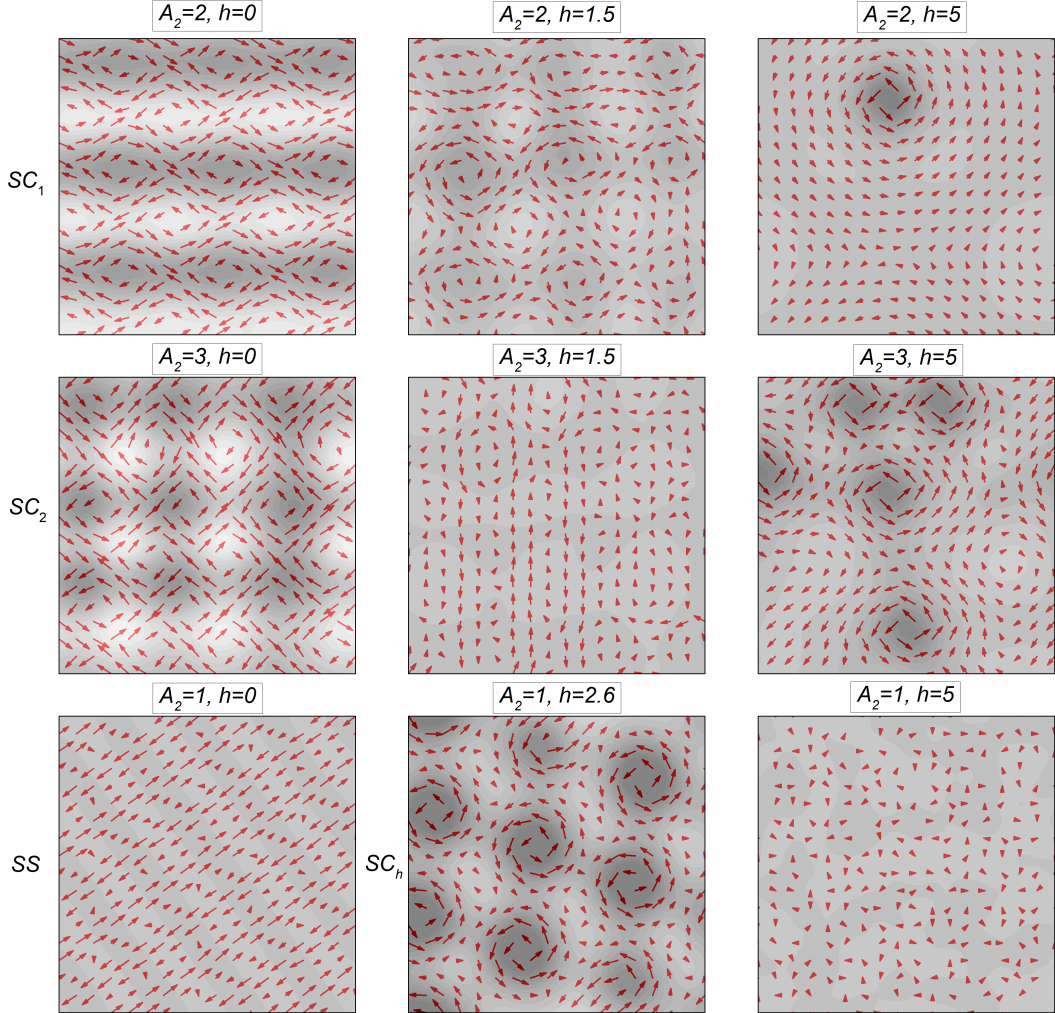


Рисунок 5.6 — Изменение магнитной структуры фаз  $SC_1$ ,  $SC_2$ ,  $SS$  под действием магнитного поля. Темными и светлыми участками обозначены значения локальной хиральности  $\Upsilon_{i,j}$ . Красными стрелками обозначены направления спинов в плоскости  $(x,y)$ .

Влияние температуры на конфигурацию спинов скирмионных фаз показано на рисунке 5.7. При повышении температуры для фазы  $SC_1$  пропадает периодичность структуры по одной из осей (около  $T = 0.2$ ), т.е. одна спиновая спираль исчезает, о чем наглядно свидетельствует исчезновение двух малых пиков на профиле интенсивностей. Однако величина двух других пиков Брэгга при этом остается неизменной (до  $T < 0.4$ ). При дальнейшем повышении темпе-

ратуры пропадает периодичность и по второй оси, и при температуре  $T > 0.5$  усредненные направления спинов близки к нулю.

Периодическая структура фазы  $SC_2$  начинает разрушаться при более высоких температурах ( $T > 0.4$ ), чем в случае  $SC_1$ . При этом периодичность структуры по осям  $x$  и  $y$  исчезает почти равномерно, и система не переходит в состояние с одной спиралью.

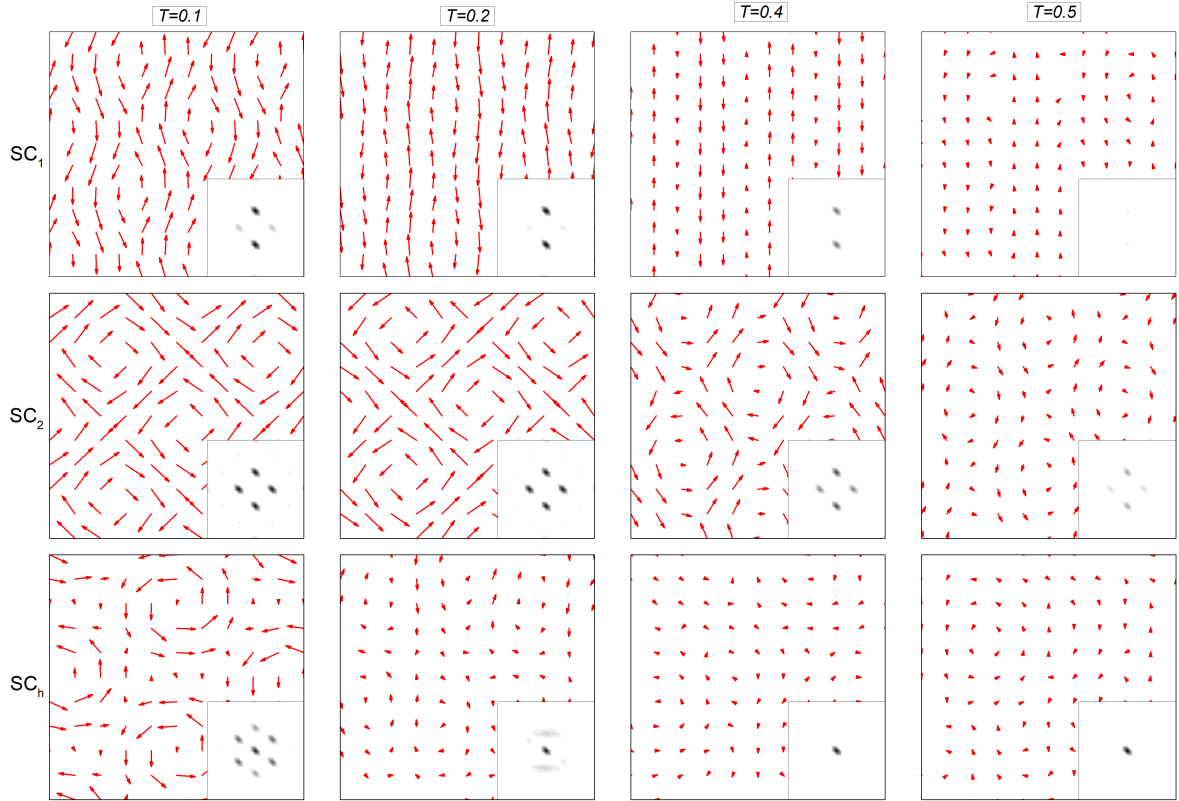


Рисунок 5.7 — Эволюция конфигурации спинов при повышении температуры. В правом нижнем углу для каждой температуры изображен соответствующий профиль интенсивности. Стрелками обозначены направления отдельных спинов в плоскости  $(x,y)$ .

Внешнее магнитное поле, направленное по оси  $z$ , даёт преимущество для спинов, ориентируемых перпендикулярно плоскости  $(x,y)$ , поэтому с повышением температуры модулированная структура фазы  $SC_h$  в плоскости  $(x,y)$  исчезает, и система переходит в ФМ фазу.

Для определения температуры фазового перехода использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка (3.13) для различных размеров решеток. Вместо намагниченности  $m$  была выбрана амплитуда малых пиков Брэгга на профиле интенсивности  $|\langle \mathbf{S}_k \rangle|^2$  для фазы  $SC_1$ . Определение температуры фа-

зового перехода схематично изображено на рисунке 5.8. Температура фазового перехода для фазы  $SC_1$  составила 0.19, для фазы  $SC_2$  - 0,55.

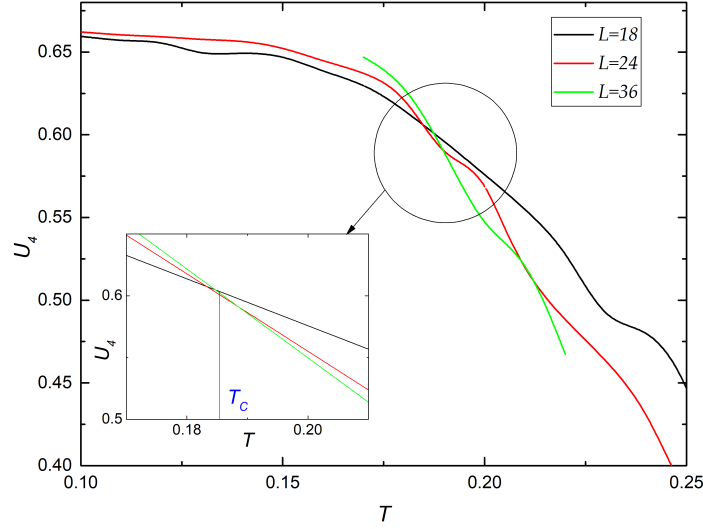


Рисунок 5.8 — Определение температуры фазового перехода  $T_c$  методом кумулянта Биндера четвертого порядка для фазы  $SC_1$ .

Влияние температуры на спиновую структуру можно исследовать с помощью определения параметра порядка, что непросто сделать для неколлинеарного расположения спинов [41]. Для этого необходимо провести сравнение спиновой конфигурации  $\mathbf{S}_r$  при температуре  $T$  на каждом МК-шаге с основным состоянием системы. Далее нужно провести усреднение по всем МК-шкагам и по всем спином. Таким образом, параметр порядка  $Q$  определяется аналогично параметру порядка Эдварда-Андерсона для спиновых стекол [204]:

$$Q(T) = \frac{1}{L^2 n_{step}} \sum_r \left| \sum_{n_{step}} \mathbf{S}_r(T) \cdot \mathbf{S}_r^0 \right|, \quad (5.5)$$

где  $\mathbf{S}_r(T)$  - конфигурация магнитной системы при температуре  $T$  для каждого МК-шага,  $n_{step}$  - общее количество МК-шагов,  $L$  - размер решетки,  $\mathbf{S}_r^0$  - основное состояние магнитной системы. При таком определении параметр порядка  $Q(T)$  будет близок к единице, когда все спины в текущей конфигурации слабо отклоняется от основного состояния, а при переходе в парамагнитную фазу  $Q(T)$  будет близок к 0.

Далее необходимо рассмотреть вопрос о том, является ли скирмионная фаза основным состоянием исследуемой системы. Для этого были рассчитаны конфигурации магнитной системы для трёх скирмионных фаз при нулевой

температуре с помощью алгоритма Метрополиса, при этом все энергетически невыгодные изменения конфигурации отбрасывались. Расчет подтвердил, что основным состоянием системы при параметрах  $(A_2, h) = (2, 0)$  и  $(3, 0)$  действительно является скирмионная фаза, состоящая из двух спиновых спиралей. Однако для  $(A_2, h) = (1, 2)$  этого сделать не удалось.

Температурная зависимость параметра порядка  $Q(T)$  для скирмионных фаз  $SC_1$ ,  $SC_2$  показана на рисунке 5.9.

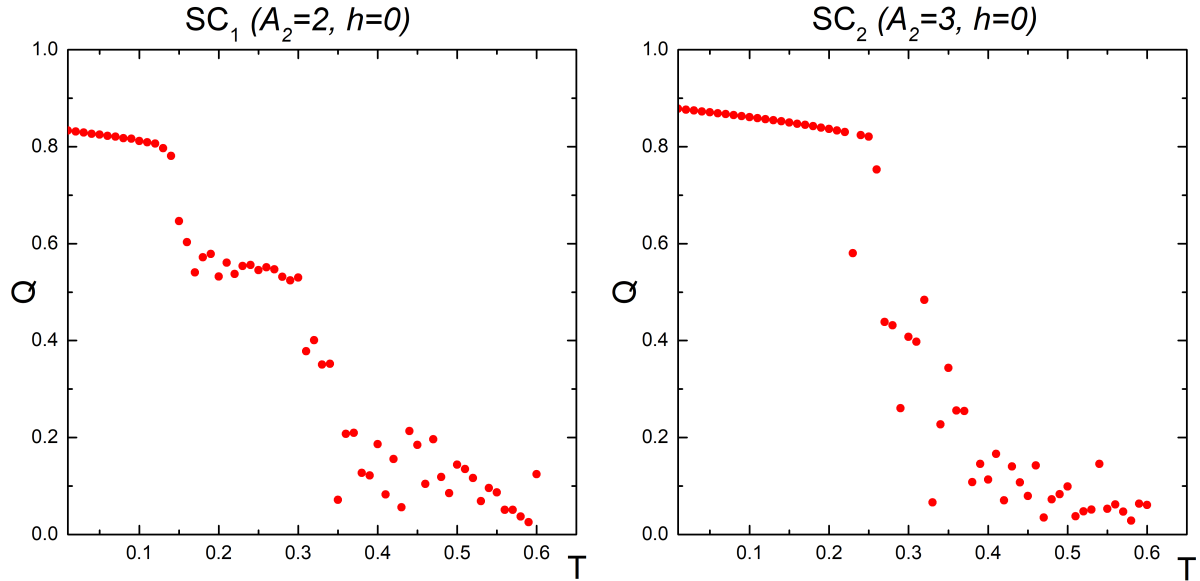


Рисунок 5.9 — Зависимость параметра порядка от температуры для скирмионных фаз  $SC_1$ ,  $SC_2$ .

Обращая внимание на то, что здесь было важно исследовать процесс разрушения скирмионной фазы, в качестве основного состояния были рассмотрены также конфигурации, полученные другим путем.

Так как основным показателем, определяющим тип спиновой конфигурации, стал профиль интенсивностей  $|\langle \mathbf{S}_k \rangle|^2$ , то и факт перехода из одной конфигурации к другой можно отследить по изменению этого профиля. Поэтому в качестве основного состояния можно взять такие спиновые конфигурации, которые соответствовали бы профилям интенсивностей для скирмионной фазы. Чтобы получить такие конфигурации, профили интенсивностей, полученные при  $T = 0.01$  были очищены от всех примесей, то есть были оставлены только основные пики. Далее с помощью обратного Фурье-преобразования получены требуемые конфигурации. Они и были приняты в качестве основного состояния при расчете зависимости  $Q(T)$  на рисунке 5.10.

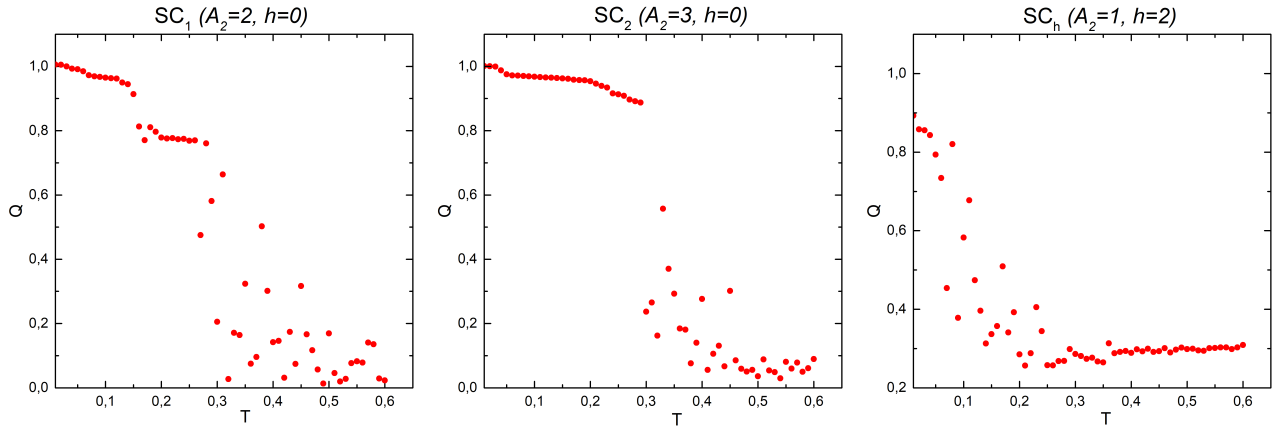


Рисунок 5.10 — Зависимость  $Q(T)$  для фаз  $SC_1$ ,  $SC_2$ ,  $SC_h$  при  $\mathbf{S}_r^0$ , полученном с помощью обратного Фурье-преобразования.

Сравнение рисунков 5.9 и 5.10 говорит о качественном совпадении зависимостей  $Q(T)$  при  $\mathbf{S}_r^0$ , полученном с помощью алгоритма Метрополиса и с помощью обратного преобразования Фурье.

По зависимости  $Q(T)$  для фазы  $SC_1$  можно сделать вывод о том, что переход в парамагнитную фазу осуществлялся в два этапа. Для понимания этого процесса рассмотрим температурную зависимость параметра порядка отдельно для каждой компоненты. На рисунке 5.11 изображены отдельно зависимости  $Q_x(T)$ ,  $Q_y(T)$  и  $Q_z(T)$ .

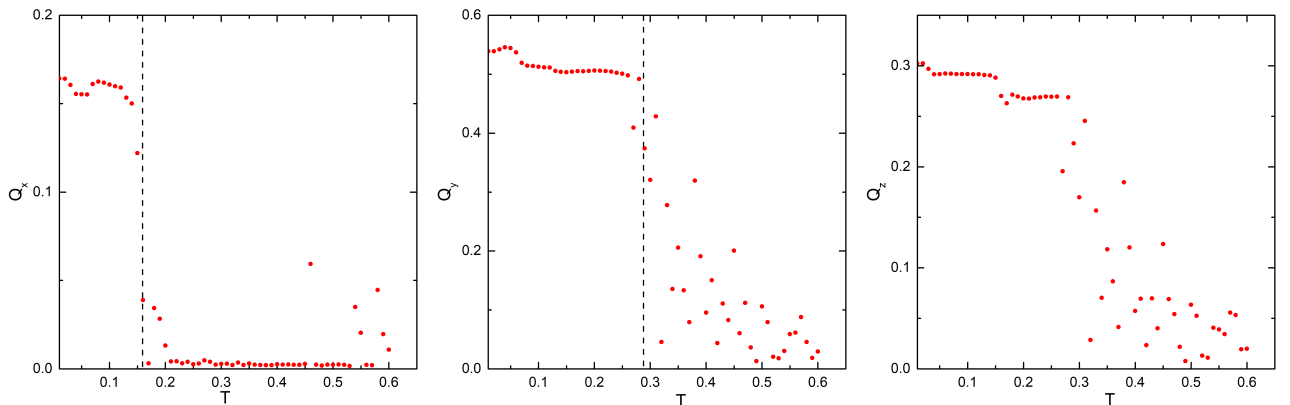


Рисунок 5.11 — Параметр порядка отдельных компонент спиновых конфигураций для фазы  $SC_1$ .

Рисунок 5.11 показывает, что для  $T < 0.1$  фаза  $SC_1$  сохраняется, в промежутке от  $T = 0.1$  до  $0.2$  пропадает упорядочение по оси  $x$ , что соответствует картине, представленной на рисунке 5.7. Для  $T > 0.3$  пропадает порядок по оси

*y*. При этой же температуре начинает разрушаться фаза  $SC_2$ . Фаза  $SC_h$  начинает разрушаться ещё при температуре  $T < 0.1$  и к  $T \approx 0.3$  переходит в ФМ фазу.

### 5.3 Учёт влияния подложки

Было исследовано влияние подложки на магнитную систему, которое проявляется через взаимодействие атомов 2D-магнетика и подложки. Влияние атомов подложки на геометрическое положение атомов 2D-магнетика моделируется с помощью двумерного потенциала Френкеля–Конторовой [175] с периодически расположенными потенциальными ямами (3.6). Упругое взаимодействие между атомами 2D-магнетика описывается в гармоническом приближении (3.9).

Влияние подложки на магнитную систему проявлялось через зависимость обменного интеграла от расстояния между атомами магнетика (3.5).

Перед началом исследования магнитной структуры находилось равновесное положение атомов магнетика при помощи метода последовательных итераций. В качестве одной итерации выступало пробное смещение каждого атома на случайный вектор. Если новое положение атома уменьшало общую энергию системы, то оно принималось.

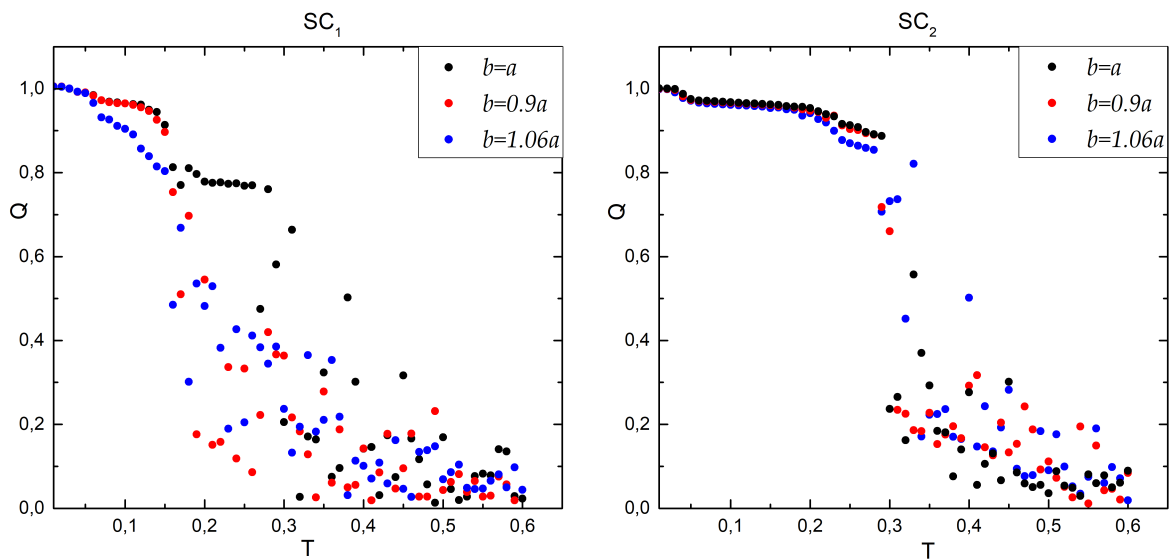


Рисунок 5.12 — Зависимость  $Q(T)$  при различных значениях периода потенциала подложки  $b$ .

Влияние потенциала подложки на температурную эволюцию скирмионных конфигураций показано на рисунке 5.12. Тут изображена зависимость параметра порядка от температуры для фаз  $SC_1$  и  $SC_2$ . На графике для  $SC_1$  можно заметить, что при наличии подложки скирмионная структура начинает разрушаться при  $T > 0.2$  не переходя в состояние с одной спиновой спиралью. При этом, в случае если период потенциала больше постоянной решетки магнетика, скирмионная структура начинает разрушаться раньше. Для фазы  $SC_2$  существенного влияния потенциала подложки на спиновые конфигурации замечено не было.

#### 5.4 Выводы по главе

В настоящей главе приведены результаты исследования 2D-магнетика со скирмионной структурой при помощи Монте-Карло моделирования. Были выделены несколько скирмионных фаз с различной структурой, исследовано влияние на них температуры и внешнего магнитного поля. Влияние магнитного поля проявлялось в нарушении периодичной магнитной структуры и образовании одиночных скирмионов с последующим переходом в ФМ фазу. При повышении температуры скирмионная структура разрушалась, а процесс разрушения различался для каждой фазы.

Было проведено исследование влияния немагнитной подложки на структуру 2D-магнетика. Подложка моделировалась путём введения в энергию системы двумерного потенциала Френкеля-Конторовой с периодом, близким к постоянной решётки магнетика. Результатом введения потенциала подложки стало разрушение скирмионной структуры при более низких температурах (для периода потенциала больше постоянной решётки) и исчезновение перехода из скирмионной фазы, состоящей из двух спиралей в фазу, состоящую из одной спирали.

Основные результаты главы опубликованы в работах [A8—A10].

## Заключение

1. Подтверждено предположение о том, что сегнетоэлектричество в кристалле  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  вызвано смещениями магнитных ионов в результате формирования спиновой структуры  $\uparrow\downarrow$ . Полученные температурные зависимости термодинамических параметров системы качественно согласуются с экспериментальными данными, что говорит о способности построенной модели описывать реальные вещества.
2. В работе проведено исследование влияния немагнитной подложки на свойства 1D и 2D-магнетиков и их структуру. Несовпадение периода потенциала подложки и постоянной решетки магнетика приводит к изменению расстояния между атомами магнетика, вследствие чего изменяются и обменные интегралы, а следовательно могут меняться критические индексы системы и температура фазового перехода.
3. Смоделировано влияние внешнего электрического поля на магнитную плёнку через СЭ подложку с помощью потенциала Френкеля-Конторовой, период которого не совпадает с межатомным расстоянием магнитной пленки по одной из осей. В результате получены зависимости температуры Кюри и намагниченности тонкой пленки от напряженности внешнего электрического поля. Также получены аналитические выражения для этих параметров в рамках теории среднего поля. Сравнение аналитических выражений и зависимостей, полученных в ходе моделирования говорит о том, что теория среднего поля применима только при слабых электрических полях.
4. Моделирование влияния подложки с помощью двумерного периодического потенциала, когда период потенциала не совпадает с постоянной решетки магнитной плёнки по обеим осям, показало, что при малых деформациях плёнки происходит линейное изменение температуры Кюри, критические индексы при этом остаются неизменными. Если период потенциала отличается от постоянной решётки пленки более чем на 5% происходит перестройка кристаллической решётки плёнки, изменяется класс универсальности ФМ плёнки, о чем свидетельствует полученная зависимость критических индексов от периода потенциала подложки.

5. В рамках модели Гейзенберга получена скирмионная магнитная структура в 2D-магнетике. Выделены 3 скирмионные фазы и проведено исследование влияния внешнего магнитного поля и температуры на формирование магнитного порядка. Показано, что с помощью внешнего магнитного поля можно добиться перехода из фазы со спиральным магнитным упорядочением в фазу со скирмионным магнитным порядком. При учёте периодического потенциала подложки разрушение скирмионной структуры происходит при более низкой температуре, а также изменяется характер перехода из скирмионной в парамагнитную фазу.

## Благодарности

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Игорю Валерьевичу Бычкову за многолетнюю помощь и поддержку в выборе жизненного пути в научной сфере.

За неоценимую помощь и дельные советы при подготовке диссертации автор благодарит соавторов Кузьмина Дмитрия Александровича, Белима Сергея Викторовича, Кузнецова Ивана Александровича.

Искреннюю благодарность хочется выразить всему коллективу физического факультета ЧелГУ и коллективу кафедры радиофизики и электроники в частности за здоровую, доброжелательную атмосферу. Особо хочу отметить тех людей, которые вдохновляли меня с самого начала учёбы в университете, это мои бывшие однокурсники Мирошкина Ольга Николаевна, Дёмин Антон Сергеевич.

За моральную поддержку, оказанную во время подготовки диссертации хочу поблагодарить свою жену Мальцеву Ольгу Райхановну.

## Список литературы

1. *M. Steiner, J. V.* Theoretical and experimental studies on one-dimensional magnetic systems / J. V. M. Steiner, C. Windsor // *Advances in Physics*. — 1976. — Vol. 25, no. 2. — P. 87—209.
2. A review of 1D magnetic nanomaterials in microwave absorption / X. Su, Y. Liu, Z. Liao, [et al.] // *Journal of Materials Science*. — 2023. — Vol. 58, issue 2. — P. 636—663.
3. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, [et al.] // *Science*. — 2004. — Vol. 306, no. 5696. — P. 666—669.
4. Two-dimensional atomic crystals / K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, [et al.] // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2005. — Vol. 102, no. 30. — P. 10451—10453.
5. 2D materials and van der Waals heterostructures / K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, [et al.] // *Science*. — 2016. — Vol. 353, no. 6298. — aac9439.
6. Van der Waals heterostructures and devices / Y. Liu, N. O. Weiss, X. Duan, [et al.] // *Nature Reviews Materials*. — 2016. — Vol. 1, issue 9. — P. 16042.
7. 2D transition metal dichalcogenides / S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, [et al.] // *Nature Reviews Materials*. — 2017. — Vol. 2, issue 8. — P. 17033.
8. Coupling of Crystal Structure and Magnetism in the Layered, Ferromagnetic Insulator  $\text{CrI}_3$  / M. A. McGuire, H. Dixit, V. R. Cooper, [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2015. — Vol. 27, no. 2. — P. 612—620.
9. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals / C. Gong, L. Li, Z. Li, [et al.] // *Nature*. — 2017. — Vol. 546, issue 7657. — P. 265—269.
10. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit / B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, [et al.] // *Nature*. — 2017. — Vol. 546, issue 7657. — P. 270—273.

11. *Jongh, L. J. de.* Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds. / L. J. de Jongh. — Springer Dordrecht, 1990.
12. *Jongh, L. J. de.* Experiments on simple magnetic model systems / L. J. de Jongh, A. R. Miedema // Advances in Physics. — 1974. — Vol. 23, no. 1. — P. 1—260.
13. Magnetic 2D materials and heterostructures / M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo, [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2019. — Vol. 14, issue 5. — P. 408—419.
14. *Peierls, R.* On Ising's model of ferromagnetism / R. Peierls // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1936. — Vol. 32, no. 3. — P. 477—481.
15. *Mermin, N. D.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models / N. D. Mermin, H. Wagner // Phys. Rev. Lett. — 1966. — Vol. 17, issue 22. — P. 1133—1136.
16. *Hohenberg, P. C.* Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions / P. C. Hohenberg // Phys. Rev. — 1967. — Vol. 158, issue 2. — P. 383—386.
17. *Heisenberg, W.* Zur Theorie des Ferromagnetismus / W. Heisenberg // Z. Phys. — 1928. — Vol. 49, issue 9. — P. 619—636.
18. *Onsager, L.* Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition / L. Onsager // Phys. Rev. — 1944. — Vol. 65, issue 3/4. — P. 117—149.
19. *Berezinsky, V. L.* Destruction of long range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group. I. Classical systems / V. L. Berezinsky // Sov. Phys. JETP. — 1971. — Vol. 32. — P. 493—500.
20. *Kosterlitz, J. M.* Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems / J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless // Journal of Physics C: Solid State Physics. — 1973. — Vol. 6, no. 7. — P. 1181—1203.
21. *Barla, P.* Spintronic devices: a promising alternative to CMOS devices / P. Barla, V. Joshi, S. Bhat // Journal of Computational Electronics. — 2021. — Vol. 20, issue 2. — P. 805—837.

22. The promise of spintronics for unconventional computing / G. Finocchio, M. Di Ventra, K. Y. Camsari, [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2021. — Vol. 521. — P. 167506.
23. A strategy for the design of skyrmion racetrack memories / R. Tomasello, E. Martinez, R. Zivieri, [et al.] // Scientific Reports. — 2014. — Vol. 4. — P. 6784.
24. *Parkin, S.* Memory on the racetrack / S. Parkin, S.-H. Yang // Nature Nanotechnology. — 2015. — Vol. 10, issue 3. — P. 195—198.
25. An Improved Racetrack Structure for Transporting a Skyrmion / P. Lai, G. Zhao, H. Tang, [et al.] // Scientific Reports. — 2017. — Vol. 7, issue 1. — P. 45330.
26. *Luo, S.* Skyrmion devices for memory and logic applications / S. Luo, L. You // APL Materials. — 2021. — Vol. 9, no. 5. — P. 050901.
27. Voltage Controlled Magnetic Skyrmion Motion for Racetrack Memory / W. Kang, Y. Huang, C. Zheng, [et al.] // Scientific Reports. — 2016. — Vol. 6, issue 1. — P. 23164.
28. Reconfigurable Skyrmion Logic Gates / S. Luo, M. Song, X. Li, [et al.] // Nano Letters. — 2018. — Vol. 18, no. 2. — P. 1180—1184 ; — PMID: 29350935.
29. SkyLogic—A Proposal for a Skyrmion-Based Logic Device / M. G. Mankalale, Z. Zhao, J.-P. Wang, [et al.] // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2019. — Vol. 66, no. 4. — P. 1990—1996.
30. Skyrmion Logic System for Large-Scale Reversible Computation / M. Chauwin, X. Hu, F. Garcia-Sanchez, [et al.] // Phys. Rev. Appl. — 2019. — Vol. 12, issue 6. — P. 064053.
31. Stochastic Computing Implemented by Skyrmionic Logic Devices / H. Zhang, D. Zhu, W. Kang, [et al.] // Phys. Rev. Appl. — 2020. — Vol. 13, issue 5. — P. 054049.
32. *Iwasaki, J.* Current-induced skyrmion dynamics in constricted geometries / J. Iwasaki, M. Mochizuki, N. Nagaosa // Nature Nanotechnology. — 2013. — Vol. 8, issue 10. — P. 742—747.

33. Corrigendum: Room-temperature chiral magnetic skyrmions in ultrathin magnetic nanostructures / O. Boulle, J. Vogel, H. Yang, [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2017. — Vol. 12. — P. 830—830.
34. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures / J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2013. — Vol. 8, issue 11. — P. 839—844.
35. Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets / S. Woo, K. Litzius, B. Krüger, [et al.] // Nature Materials. — 2016. — Vol. 15, issue 5. — P. 501—506.
36. Room-Temperature Skyrmions in an Antiferromagnet-Based Heterostructure / G. Yu, A. Jenkins, X. Ma, [et al.] // Nano Letters. — 2018. — Vol. 18, no. 2. — P. 980—986 ; — PMID: 29271208.
37. Room-Temperature Skyrmions at Zero Field in Exchange-Biased Ultrathin Films / K. G. Rana, A. Finco, F. Fabre, [et al.] // Phys. Rev. Appl. — 2020. — Vol. 13, issue 4. — P. 044079.
38. Creating zero-field skyrmions in exchange-biased multilayers through X-ray illumination / Y. Guang, I. Bykova, Y. Liu, [et al.] // Nature Communications. — 2020. — Vol. 11, issue 1. — P. 949.
39. Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature / C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren, [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2016. — Vol. 11, issue 5. — P. 444—448.
40. Creating an Artificial Two-Dimensional Skyrmion Crystal by Nanopatterning / L. Sun, R. X. Cao, B. F. Miao, [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Vol. 110, issue 16. — P. 167201.
41. *Sharafullin, I. F.* Skyrmion Crystals and Phase Transitions in Magneto-Ferroelectric Superlattices: Dzyaloshinskii–Moriya Interaction in a Frustrated J1 J2 Model / I. F. Sharafullin, H. T. Diep // Symmetry. — 2020. — Vol. 12, no. 1.

42. Frustrated antiferromagnetic triangular lattice with Dzyaloshinskii–Moriya interaction: Ground states, spin waves, skyrmion crystal, phase transition / S. E. Hog, I. F. Sharafullin, H. Diep, [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2022. — Vol. 563. — P. 169920.
43. *Hu, X.-C.* A theory of skyrmion crystal formation / X.-C. Hu, H.-T. Wu, X. R. Wang // Nanoscale. — 2022. — Vol. 14, issue 20. — P. 7516—7529.
44. Current-driven dynamics of chiral ferromagnetic domain walls / S. Emori, U. Bauer, S.-M. Ahn, [et al.] // Nature Materials. — 2013. — Vol. 12, issue 7. — P. 611—616.
45. Electrical detection of magnetic skyrmions by tunnelling non-collinear magnetoresistance / C. Hanneken, F. Otte, A. Kubetzka, [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2015. — Vol. 10, issue 12. — P. 1039—1042.
46. *Hamamoto, K.* Purely electrical detection of a skyrmion in constricted geometry / K. Hamamoto, M. Ezawa, N. Nagaosa // Applied Physics Letters. — 2016. — Vol. 108, no. 11. — P. 112401.
47. Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions / N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, [et al.] // Science. — 2013. — Vol. 341, no. 6146. — P. 636—639.
48. *Люксютов, И. Ф.* Двумерные кристаллы. / И. Ф. Люксютов, А. Г. Наумовец, В. Л. Покровский. — Киев: Наукова думка, 1988. — 220 с.
49. Исследование фазового перехода в двумерной структурированной наносистеме / С. В. Белим, И. В. Бычков, Д. А. Кузьмин [и др.] // Челяб. физ.-матем. журн. — 2020. — Т. 5, 4(1). — С. 463—470.
50. *Udalov, O. G.* Tuning the magnetic state in a phase-separated magnetic oxide thin film by means of electric field and temperature / O. G. Udalov, I. S. Beloborodov // Phys. Rev. B. — 2020. — Vol. 101, issue 17. — P. 174433.
51. Strain and electric field control of magnetism in  $\text{La}_{(1-x)}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  thin films on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrates / M. Schmitz, A. Weber, O. Petravic, [et al.] // New Journal of Physics. — 2020. — Vol. 22, no. 5. — P. 053018.
52. Phase Transition-Induced Modulation of Exchange Bias in  $\text{Fe}/\text{BiFeO}_3$  Bilayers / L. Wang, Z. Li, C. Wang, [et al.] // Science of Advanced Materials. — 2020. — Vol. 12, no. 5. — P. 701—706.

53. Structural, electronic, transport and magnetic studies of  $\text{LaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$  ( $x = 0, 0.3$ ) thin films / A. Kumar, V. Kumar, D. Shukla, [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2019. — Vol. 126, no. 23. — P. 235103.
54. Induced high-temperature ferromagnetism by structural phase transitions in strained antiferromagnetic  $\gamma\text{-Fe}_{50}\text{Mn}_{50}$  epitaxial films / Y. Hwang, S. Choi, J. Choi, [et al.] // Scientific Reports. — 2019. — Vol. 9, issue 1. — P. 3669.
55. *Frenkel, Y.* / Y. Frenkel, T. Kontorova // Phys. Z. Sowietunion. — 1938. — Vol. 13. — P. 1.
56. *Конторова, Т.* / Т. Конторова, Я. Френкель // ЖЭТФ. — 1938. — Т. 8. — С. 89—95.
57. *Jiang, S.* Electric-field switching of two-dimensional van der Waals magnets / S. Jiang, J. Shan, K. F. Mak // Nature Materials. — 2018. — Vol. 17, issue 5. — P. 406—410.
58. Ferroelectric-driven tunable magnetism in ultrathin platinum films / Q. Sun, F. Mahfouzi, J. P. Velev, [et al.] // Phys. Rev. Materials. — 2020. — Vol. 4, issue 12. — P. 124401.
59. *Ghidini, M.* Nanoscale magnetoelectric effects revealed by imaging / M. Ghidini, S. Dhesi, N. Mathur // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2021. — Vol. 520. — P. 167016 ; — Magnetic materials and their applications: in Memory of Dominique Givord.
60. Giant magnetoelectric effect in perpendicularly magnetized Pt/Co/Ta ultrathin films on a ferroelectric substrate / A. Chen, H. Huang, Y. Wen, [et al.] // Mater. Horiz. — 2020. — Vol. 7, issue 9. — P. 2328—2335.
61. Enhanced Magnetoelectric Effects in Self-Assembled Hemispherical Close-Packed  $\text{CoFe}_2\text{O}_3\text{-Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$  Thin Film / S. Meenachisundaram, N. Wakiya, C. Muthamizhchelvan, [et al.] // Journal of Electronic Materials. — 2021. — Vol. 50, issue 4. — P. 1699.
62. Wide range voltage-impulse-controlled nonvolatile magnetic memory in magnetoelectric heterostructure / W. Du, M. Liu, H. Su, [et al.] // Applied Physics Letters. — 2020. — Vol. 117, no. 22. — P. 222401.

63. Strengthened magnetoelectric coupling in  $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{Ni}$  composite through interface modification with  $\text{LaNiO}_3$  buffer layer / A.-p. Wang, G. Song, F.-p. Zhou, [et al.] // *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* — 2021. — Vol. 32, issue 5. — P. 5920.
64. Impact of heat-treatment conditions on ferroelectric, ferromagnetic and magnetoelectric properties of multi-layered composite films of  $\text{Ba}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{TiO}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$  / M. Shi, Y. Xu, Q. Zhang, [et al.] // *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* — 2019. — Vol. 30, issue 21. — P. 19343.
65. Impact of compressive and tensile epitaxial strain on transport and nonlinear optical properties of magnetoelectric  $\text{BaTiO}_3\text{-(LaCa)MnO}_3$  tunnel junction / M. S. Ivanov, A. M. Buryakov, P. M. Vilarinho, [et al.] // *Journal of Physics D: Applied Physics.* — 2021. — Vol. 54, no. 27. — P. 275302.
66. *Apostolova, I.* Room temperature ferromagnetism in multiferroic  $\text{BaCoF}_4$  thin films due to surface, substrate and ion doping effects / I. Apostolova, A. Apostolov, J. Wesselinowa // *Thin Solid Films.* — 2021. — Vol. 722. — P. 138567.
67. Cumulative effects of fluctuations and magnetoelectric coupling in two-dimensional  $\text{RMnO}_3$  ( $\text{R} = \text{Tb}, \text{Lu}$  and  $\text{Y}$ ) multiferroics / G. Tongue Magne, R. Keumo Tsiaze, A. Fotué, [et al.] // *Physics Letters A.* — 2021. — Vol. 400. — P. 127305.
68. *Калгин, А. В.* МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ: ИСТОРИЯ, СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ / А. В. Калгин, Е. С. Григорьев, З. Х. Граби // *Альтернативная энергетика и экология.* — 2013. — Т. 03/2(122). — С. 49—63.
69. *Aizu, K.* Possible Species of Ferromagnetic, Ferroelectric, and Ferroelastic Crystals / K. Aizu // *Phys. Rev. B.* — 1970. — Vol. 2, issue 3. — P. 754—772.
70. *Schmid, H.* Multi-ferroic magnetoelectrics / H. Schmid // *Ferroelectrics.* — 1994. — Vol. 162, no. 1. — P. 317—338.
71. *Eerenstein, W.* Multiferroic and magnetoelectric materials / W. Eerenstein, N. D. Mathur, J. F. Scott // *Nature.* — 2006. — Vol. 442. — P. 759—765.

72. *Смоленский, Г. А.* Сегнетомагнетики / Г. А. Смоленский, И. Е. Чупис // Усп. физ. наук. — 1982. — Т. 137, № 7. — С. 415—448.
73. *Chupis, I. E.* Progress in studying ferroelectromagnetic crystals / I. E. Chupis // Low Temperature Physics. — 2010. — Vol. 36, no. 6. — P. 477—488.
74. *Пятаков, А. П.* Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики / А. П. Пятаков, А. К. Звездин // Усп. физ. наук. — 2012. — Т. 182, № 6. — С. 593—620.
75. Исследование  $\text{EuMn}_2\text{O}_5$  с помощью  $\mu\text{SR}$ -метода / С. И. Воробьев, Е. И. Головенчиц, В. П. Коптев [и др.] // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Т. 91, вып. 10. — С. 561.
76. Reinvestigation of Simultaneous Magnetic and Ferroelectric Phase Transitions in  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  / S. Kobayashi, T. Osawa, H. Kimura, [et al.] // Journal of the Physical Society of Japan. — 2004. — Vol. 73, no. 6. — P. 1593—1596.
77. Magnetic structure in iron borates  $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $\text{R} = \text{Y}, \text{Ho}$ ): a neutron diffraction and magnetization study / C. Ritter, A. Vorotynov, A. Pankrats, [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2008. — Vol. 20, no. 36. — P. 365209.
78. Ferroelectricity in  $\text{BaM}^{2+}\text{F}_4$  / M. Eibschütz, H. Guggenheim, S. Wemple, [et al.] // Physics Letters A. — 1969. — Vol. 29, no. 7. — P. 409—410.
79. Dielectric behavior of ferroelectric  $\text{BaMF}_4$  above room temperature / M. DiDomenico, M. Eibschütz, H. Guggenheim, [et al.] // Solid State Communications. — 1969. — Vol. 7, no. 16. — P. 1119—1122.
80. *Keve, E. T.* Crystal Structure of Pyroelectric Paramagnetic Barium Manganese Fluoride,  $\text{BaMnF}_4$  / E. T. Keve, S. C. Abrahams, J. L. Bernstein // The Journal of Chemical Physics. — 1969. — Vol. 51, no. 11. — P. 4928—4936.
81. *Scott, J. F.* Phase transitions in  $\text{BaMnF}_4$  / J. F. Scott // Reports on Progress in Physics. — 1979. — Vol. 42, no. 6. — P. 1055—1084.
82. *Ederer, C.* Origin of ferroelectricity in the multiferroic barium fluorides  $\text{BaMF}_4$ : A first principles study / C. Ederer, N. A. Spaldin // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 74, issue 2. — P. 024102.

83. *Khomskii, D.* Classifying multiferroics: Mechanisms and effects / D. Khomskii // *Physics*. — 2009. — Vol. 2, no. 20.
84. Magnetic control of ferroelectric polarization / T. Kimura, T. Goto, H. Shintani, [et al.] // *Nature*. — 2003. — Vol. 426. — P. 55—58.
85. Electric polarization reversal and memory in a multiferroic material induced by magnetic fields / N. Hur, S. Park, P. A. Sharma, [et al.] // *Nature*. — 2004. — Vol. 429, no. 14. — P. 392—395.
86. *Brown, W. F.* Upper Bound on the Magnetoelectric Susceptibility / W. F. Brown, R. M. Hornreich, S. Shtrikman // *Phys. Rev.* — 1968. — Т. 168, вып. 2. — С. 574—577.
87. *Соболев, И. М.* Численные методы Монте-Карло. / И. М. Соболев. — М.: Наука, 1973.
88. *Binder, K.* Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. / K. Binder, D. W. Heermann. — Springer-Verlag, 1988.
89. *Stanley, H. E.* Introduction to phase transitions and critical phenomena. / H. E. Stanley. — Clarendon press, Oxford, 1971.
90. *Baxter, R.* Exactly Solved Models in Statistical Mechanics / R. Baxter. — Academic Press, 1982.
91. *Metropolis, N.* The Monte Carlo Method / N. Metropolis, S. Ulam // *Journal of the American Statistical Association*. — 1949. — Vol. 44, no. 247. — P. 335—341.
92. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, [et al.] // *The Journal of Chemical Physics*. — 1953. — Vol. 21, no. 6. — P. 1087—1092.
93. *Wood, W. W.* Monte Carlo Equation of State of Molecules Interacting with the Lennard-Jones Potential. I. A Supercritical Isotherm at about Twice the Critical Temperature / W. W. Wood, F. R. Parker // *The Journal of Chemical Physics*. — 1957. — Vol. 27, no. 3. — P. 720—733.
94. *Прудников, В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. / В. Прудников, А. Вакилов, П. Прудников. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.

95. *Binder, K.* Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions / K. Binder, D. P. Landau // Phys. Rev. B. — 1980. — Vol. 21, issue 5. — P. 1941—1962.
96. *Бирюков, А.* Компьютерное моделирование фазовых переходов в модели Изинга с дальними корреляциями / А. Бирюков, Я. Дегтярева, М. Шленков // Вестник СамГУ – Естественнонаучная серия. — 2012. — Т. 9, № 100. — С. 159—163.
97. *Peczak, P.* High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet / P. Peczak, A. M. Ferrenberg, D. P. Landau // Phys. Rev. B. — 1991. — Vol. 43, issue 7. — P. 6087—6093.
98. *Ferdinand, A. E.* Bounded and Inhomogeneous Ising Models. I. Specific-Heat Anomaly of a Finite Lattice / A. E. Ferdinand, M. E. Fisher // Phys. Rev. — 1969. — Vol. 185, issue 2. — P. 832—846.
99. *Fisher, M. E.* Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region / M. E. Fisher, M. N. Barber // Phys. Rev. Lett. — 1972. — Vol. 28, issue 23. — P. 1516—1519.
100. *Barber, M.* Finite Size Scaling, Bd. 8 aus Phase Transitions and Critical Phenomena. ed. Domb C. and Green MS / M. Barber. — 1983.
101. *Binder, K.* Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions / K. Binder // Z. Phys. B. — 1981. — Vol. 43, issue 2. — P. 119—140.
102. *Binder, K.* Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization / K. Binder // Phys. Rev. Lett. — 1981. — Vol. 47, issue 9. — P. 693—696.
103. *Binder, K.* Finite size effects on phase transitions / K. Binder // Ferroelectrics. — 1987. — Vol. 73, no. 1. — P. 43—67.
104. *Landau, D. P.* Finite-size behavior of the Ising square lattice / D. P. Landau // Phys. Rev. B. — 1976. — Vol. 13, issue 7. — P. 2997—3011.
105. *Landau, D. P.* Finite-size behavior of the simple-cubic Ising lattice / D. P. Landau // Phys. Rev. B. — 1976. — Vol. 14, issue 1. — P. 255—262.
106. Finite-size tests of hyperscaling / K. Binder, M. Nauenberg, V. Privman, [et al.] // Phys. Rev. B. — 1985. — Vol. 31, issue 3. — P. 1498—1502.

107. *Binder, K.* Critical properties and finite-size effects of the five-dimensional Ising model / K. Binder // *Z. Phys. B.* — 1985. — Т. 61, вып. 1. — С. 13—23.
108. *Ledue, D.* Static critical behavior of the ferromagnetic Ising model on the quasiperiodic octagonal tiling / D. Ledue, D. P. Landau, J. Teillet // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, issue 18. — P. 12523—12530.
109. *Janke, W.* Single-cluster Monte Carlo study of the Ising model on two-dimensional random lattices / W. Janke, M. Katoot, R. Villanova // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 49, issue 14. — P. 9644—9657.
110. *Challa, M. S. S.* Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions / M. S. S. Challa, D. P. Landau, K. Binder // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34, issue 3. — P. 1841—1852.
111. *Borgs, C.* A rigorous theory of finite-size scaling at first-order phase transitions / C. Borgs, R. Kotecký // *J. Stat. Phys.* — 1990. — Vol. 61, issue 1. — P. 79—119.
112. *Замалин, В.* Метод Монте-Карло в статистической термодинамике / В. Замалин, Г. Норман, В. Филинов. — М.: Наука, 1977.
113. *Alexander, H. W.* Elements of mathematical statistics / H. W. Alexander. — Wiley, New York, 1961.
114. *Müller-Krumbhaar, H.* Dynamic properties of the Monte Carlo method in statistical mechanics / H. Müller-Krumbhaar, K. Binder // *J. Stat. Phys.* — 1990. — Vol. 8, issue 1. — P. 1—24.
115. *Binder, K.* Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models / K. Binder, E. Luijten // *Physics Reports.* — 2001. — Vol. 344, no. 4. — P. 179—253 ; — Renormalization group theory in the new millennium.
116. *Булавин, Л.* Компьютерное моделирование физических систем. / Л. Булавин, Н. Выгорницкий, Н. Лебовка. — Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011.
117. *Goodman, J.* Multigrid Monte Carlo Method for Lattice Field Theories / J. Goodman, A. D. Sokal // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Vol. 56, issue 10. — P. 1015—1018.

118. *Goodman, J.* Multigrid Monte Carlo method. Conceptual foundations / J. Goodman, A. D. Sokal // Phys. Rev. D. — 1989. — Vol. 40, issue 6. — P. 2035—2071.
119. Simulations without critical slowing down / D. Kandel, E. Domany, D. Ron, [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Vol. 60, issue 16. — P. 1591—1594.
120. *Kandel, D.* Simulations without critical slowing down: Ising and three-state Potts models / D. Kandel, E. Domany, A. Brandt // Phys. Rev. B. — 1989. — Vol. 40, issue 1. — P. 330—344.
121. Critical acceleration of lattice gauge simulations / R. Ben-Av, D. Kandel, E. Katznelson, [et al.] // J. Stat. Phys. — 1990. — Vol. 58, issue 1. — P. 125—139.
122. *Kandel, D.* Cluster dynamics for fully frustrated systems / D. Kandel, R. Ben-Av, E. Domany // Phys. Rev. Lett. — 1990. — Vol. 65, issue 8. — P. 941—944.
123. *Creutz, M.* Overrelaxation and Monte Carlo simulation / M. Creutz // Phys. Rev. D. — 1987. — Vol. 36, issue 2. — P. 515—519.
124. *Brown, F. R.* Overrelaxed heat-bath and Metropolis algorithms for accelerating pure gauge Monte Carlo calculations / F. R. Brown, T. J. Woch // Phys. Rev. Lett. — 1987. — Vol. 58, issue 23. — P. 2394—2396.
125. *Adler, S. L.* Over-relaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions / S. L. Adler // Phys. Rev. D. — 1981. — Vol. 23, issue 12. — P. 2901—2904.
126. *Adler, S. L.* Metropolis overrelaxation for lattice gauge theory for general relaxation parameter  $\omega$  / S. L. Adler // Phys. Rev. D. — 1988. — Vol. 38, issue 4. — P. 1349—1351.
127. *Schmidt, K. E.* Using Renormalization-Group Ideas in Monte Carlo Sampling / K. E. Schmidt // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Vol. 51, issue 24. — P. 2175—2178.
128. *Faas, M.* Hierarchical Monte Carlo simulation of the Ising model / M. Faas, H. Hilhorst // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 1986. — Vol. 135, no. 2. — P. 571—590.

129. *Hahn, H.* Simulation of a critical state without critical slowing down by a renormalization group multi-grid method / H. Hahn, T. Streit // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 1988. — Vol. 154, no. 1. — P. 108—126.
130. *Stoll, E. P.* Suppressing critical slowing down in two-dimensional Ising model simulations by the multigrid Monte Carlo method / E. P. Stoll // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 1989. — Vol. 1, no. 39. — P. 6959—6966.
131. *Swendsen, R. H.* Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations / R. H. Swendsen, J.-S. Wang // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58, issue 2. — P. 86—88.
132. *Wolff, U.* Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems / U. Wolff // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 62, issue 4. — P. 361—364.
133. *Ferrenberg, A. M.* New Monte Carlo technique for studying phase transitions / A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61, issue 23. — P. 2635—2638.
134. *Ferrenberg, A. M.* Optimized Monte Carlo data analysis / A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 63, issue 12. — P. 1195—1198.
135. *Swendsen, R. H.* Replica Monte Carlo Simulation of Spin-Glasses / R. H. Swendsen, J.-S. Wang // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Vol. 57, issue 21. — P. 2607—2609.
136. *Mitsutake, A.* Replica-exchange multicanonical and multicanonical replica-exchange Monte Carlo simulations of peptides. I. Formulation and benchmark test / A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto // *The Journal of Chemical Physics*. — 2003. — Vol. 118, no. 14. — P. 6664—6675.
137. *Fortuin, C.* On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models / C. Fortuin, P. Kasteleyn // *Physica*. — 1972. — Vol. 57, no. 4. — P. 536—564.
138. *Wansleben, S.* Monte Carlo investigation of critical dynamics in the three-dimensional Ising model / S. Wansleben, D. P. Landau // *Phys. Rev. B*. — 1991. — Vol. 43, issue 7. — P. 6006—6014.

139. *Ito, N.* Non-equilibrium relaxation and interface energy of the Ising model / N. Ito // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 1993. — Vol. 196, no. 4. — P. 591—614.
140. *Kikuchi, M.* Statistical Dependence Time and Its Application to Dynamical Critical Exponent / M. Kikuchi, N. Ito // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 1993. — Vol. 62, no. 9. — P. 3052—3061.
141. *Wolff, U.* Comparison between cluster Monte Carlo algorithms in the Ising model / U. Wolff // *Physics Letters B*. — 1989. — Vol. 228, no. 3. — P. 379—382.
142. *Braun, O. M.* *The Frenkel-Kontorova Model* / O. M. Braun, Y. S. Kivshar. — Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.
143. *Rosenau, P.* Dynamics of nonlinear mass-spring chains near the continuum limit / P. Rosenau // *Physics Letters A*. — 1986. — Vol. 118, no. 5. — P. 222—227.
144. *Aubry, S.* *The New Concept of Transitions by Breaking of Analyticity in a Crystallographic Model* / S. Aubry // *Solitons and Condensed Matter Physics* / ed. by A. R. Bishop, T. Schneider. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1978. — P. 264—277.
145. *Floría, L. M.* Dissipative dynamics of the Frenkel-Kontorova model / L. M. Floría, J. J. Mazo // *Advances in Physics*. — 1996. — Vol. 45, no. 6. — P. 505—598.
146. *Dynamical Transitions in Correlated Driven Diffusion in a Periodic Potential* / O. M. Braun, T. Dauxois, M. V. Paliy, [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78, issue 7. — P. 1295—1298.
147. *Dynamics of circular arrays of Josephson junctions and the discrete sine-Gordon equation* / S. Watanabe, H. S. van der Zant, S. H. Strogatz, [et al.] // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 1996. — Vol. 97, no. 4. — P. 429—470.
148. *Hu, M.* Substrate-imposed strain engineering of multiferroic properties in BCZT/LCMO bilayer heterostructures / M. Hu, S. Li, C. Wang // *Applied Surface Science*. — 2020. — Vol. 509. — P. 145314.
149. *Odkhuu, D.* Strain-driven electric control of magnetization reversal at multiferroic interfaces / D. Odkhuu, N. Kioussis // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Vol. 97, issue 9. — P. 094404.

150. *Panchal, G.* Magnetic properties of  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  film on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrate / G. Panchal, R. J. Choudhary, D. M. Phase // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2018. — Vol. 448. — P. 262—265.
151. Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of Quasi-One-Dimensional Oxides  $\text{Ca}_3\text{CuMnO}_6$  and  $\text{Ca}_3\text{Co}_{1+x}\text{Mn}_{1-x}\text{O}_6$  / V. Zubkov, G. Bazuev, A. Tyutyunnik, [et al.] // Journal of Solid State Chemistry. — 2001. — Vol. 160, no. 2. — P. 293—301.
152. *Yao, X. Y.* Steplike magnetization of spin chains in a triangular lattice: Monte Carlo simulations / X. Y. Yao, S. Dong, J.-M. Liu // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 73, issue 21. — P. 212415.
153. Monte Carlo simulation of magnetic behavior of a spin-chain system on a triangular lattice / X. Yao, S. Dong, H. Yu, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 74, issue 13. — P. 134421.
154. Spin persistence in an antiferromagnetic triangular Ising lattice under a magnetic field / X. Yao, S. Dong, K. Xia, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76, issue 2. — P. 024435.
155. Temperature and time dependence of the field-driven magnetization steps in  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  single crystals / V. Hardy, M. R. Lees, O. A. Petrenko, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2004. — Vol. 70, issue 6. — P. 064424.
156. Ferroelectricity in an Ising Chain Magnet / Y. J. Choi, H. T. Yi, S. Lee, [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100, issue 4. — P. 047601.
157. *Fisher, M. E.* Infinitely Many Commensurate Phases in a Simple Ising Model / M. E. Fisher, W. Selke // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Vol. 44, issue 23. — P. 1502—1505.
158. Ising Magnetism and Ferroelectricity in  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  / H. Wu, T. Burnus, Z. Hu, [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Vol. 102, issue 2. — P. 026404.
159. *Zhang, Y.* Interplay between Jahn-Teller instability, uniaxial magnetism, and ferroelectricity in  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  / Y. Zhang, H. J. Xiang, M.-H. Whangbo // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 79, issue 5. — P. 054432.
160. Topological solitons and bulk polarization switch in collinear type-II multiferroics / D. C. Cabra, A. O. Dobry, C. J. Gazza, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2021. — Vol. 103, issue 14. — P. 144421.

161. Short-range ferromagnetic correlations in the spin-chain compound  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  / Z. W. Ouyang, N. M. Xia, Y. Y. Wu, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2011. — Vol. 84, issue 5. — P. 054435.
162. Spin frustration destruction and ferroelectricity modulation in  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ : Effects of Mn deficiency / L. Lin, Y. J. Guo, Y. L. Xie, [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2012. — Vol. 111, no. 7. — P. 07D901.
163. Relaxor ferroelectric nature and magnetoelectric coupling of the one dimensional frustrated  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  / G. Gong, J. Zhou, Y. Duan, [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. — 2022. — Vol. 908. — P. 164587.
164. *YE, Z.-G.* Dielectric and Structural Properties of Relaxor Ferroelectrics / Z.-G. YE, A. A. BOKOV // Ferroelectrics. — 2004. — Vol. 302, no. 1. — P. 227—231.
165. Microstructural, dielectric, magneto-electric and optical properties of single phase  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  / R. J. Pandya, S. Zinzuvadiya, P. Sengunthar, [et al.] // Physica B: Condensed Matter. — 2021. — Vol. 601. — P. 412656.
166. *Yao, X.* Monte Carlo simulation of ferroelectricity induced by collinear magnetic order in Ising spin chain / X. Yao, V. C. Lo // Journal of Applied Physics. — 2008. — Vol. 104, no. 8. — P. 083919.
167. *Privman, V.* Finite Size Scaling And Numerical Simulation Of Statistical Systems / V. Privman. — World Scientific Publishing Company, 1990.
168. *Curie, P.* Sur la symétrie dans les phénomènes physiques, symétrie d'un champ électrique et d'un champ magnétique / P. Curie // J. Phys. Theor. Appl. — 1894. — Vol. 3, no. 1. — P. 393—415.
169. *Ландау, Л. Д.* Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — Гостехиздат, 1957.
170. *Дзялошинский, И.* К вопросу о магнитно-электрическом эффекте в антиферромагнетиках / И. Дзялошинский // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 37. — С. 881.
171. *Астров, Д.* О магнитоэлектрическом эффекте в антиферромагнетиках / Д. Астров // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 984.

172. *Folen, V. J.* Anisotropy of the Magnetoelectric Effect in  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  / V. J. Folen, G. T. Rado, E. W. Stalder // *Phys. Rev. Lett.* — 1961. — Vol. 6, issue 11. — P. 607—608.
173. *Schmid, H.* Introduction to the proceedings of the 2nd international conference on magnetoelectric interaction phenomena in crystals, MEIPIC-2 / H. Schmid // *Ferroelectrics.* — 1994. — Vol. 161, no. 1. — P. 1—28.
174. *Rivera, J.-P.* On definitions, units, measurements, tensor forms of the linear magnetoelectric effect and on a new dynamic method applied to Cr-Cl boracite / J.-P. Rivera // *Ferroelectrics.* — 1994. — Vol. 161, no. 1. — P. 165—180.
175. *Frenkel, Y.* On the theory of plastic deformation and twinning / Y. Frenkel, T. Kontorova // *Acad. Sci. USSR J. Phys.* — 1939. — Vol. 1. — P. 137—149.
176. Strain gradient mediated magnetoelectricity in Fe-Ga/P(VDF-TrFE) multiferroic bilayers integrated on silicon / A. Nicolenco, A. Gómez, X.-Z. Chen, [et al.] // *Applied Materials Today.* — 2020. — Vol. 19. — P. 100579.
177. *Landau, L.* On the Theory of Phase Transitions / L. Landau // *Phys. Z. Sowjet.* — 1937. — Vol. 11. — P. 26.
178. Strain-induced elastically controlled magnetic anisotropy switching in epitaxial  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  thin films on  $\text{BaTiO}_3(001)$  / G. Panchal, D. M. Phase, V. R. Reddy, [et al.] // *Phys. Rev. B.* — 2018. — Vol. 98, issue 4. — P. 045417.
179. *Panchal, G.* Magnetic properties of  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  film on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrate / G. Panchal, R. Choudhary, D. Phase // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2018. — Vol. 448. — P. 262—265 ; — International Conference on Magnetic Materials and Applications – IC-MAGMA2017.
180. Change in magnetization of ferromagnetic Pd(001) ultrathin films induced by the strain effect of  $\text{BaTiO}_3$  / Y. Ban, K. Komatsu, S. Sakuragi, [et al.] // *Applied Physics Letters.* — 2018. — Vol. 112, no. 14. — P. 142409.
181. *Kim, J.* Observation of magnetic domain structures in epitaxial MnAs film on  $\text{GaAs}(001)$  with temperature hysteresis / J. Kim, H. Akinaga, J. Kim // *Applied Physics Letters.* — 2011. — Vol. 98, no. 10. — P. 102511.

182. The role of magnetoelastic and magnetostrictive energies in the magnetization process of MnAs/GaAs epilayers / V. Z. C. Paes, I. L. Graff, J. Varalda, [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2012. — Vol. 25, no. 4. — P. 046003.
183. In situ observation of ferromagnetic order breaking in MnAs/GaAs(001) and magnetocrystalline anisotropy of  $\alpha$ -MnAs by electron magnetic chiral dichroism / X. Fu, B. Warot-Fonrose, R. Arras, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2016. — Vol. 93, issue 10. — P. 104410.
184. Biaxial Strain in the Hexagonal Plane of MnAs Thin Films: The Key to Stabilize Ferromagnetism to Higher Temperature / V. Garcia, Y. Sidis, M. Marangolo, [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 99, issue 11. — P. 117205.
185. *Landau, D. P.* Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet / D. P. Landau, K. Binder // Phys. Rev. B. — 1978. — Vol. 17, issue 5. — P. 2328—2342.
186. *Aubry, S.* The discrete Frenkel-Kontorova model and its extensions: I. Exact results for the ground-states / S. Aubry, P. Le Daeron // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 1983. — Vol. 8, no. 3. — P. 381—422.
187. *Chou, W.* Ground states of one-dimensional systems using effective potentials / W. Chou, R. B. Griffiths // Phys. Rev. B. — 1986. — Vol. 34, issue 9. — P. 6219—6234.
188. *Hupalo, M.* “Devil’s Staircase” in Pb/Si(111) Ordered Phases / M. Hupalo, J. Schmalian, M. C. Tringides // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 90, issue 21. — P. 216106.
189. The ground state of the Frenkel–Kontorova model / A. Y. Babushkin, A. K. Abkaryan, B. S. Dobronets, [et al.] // Phys. Solid State. — 2016. — Vol. 58, issue 9. — P. 1834—1845.
190. Ground state of a periodic elastic atomic chain in an arbitrary periodic potential / A. K. Abkaryan, A. Y. Babushkin, B. S. Dobronets, [et al.] // Phys. Solid State. — 2016. — Vol. 58, issue 2. — P. 346—350.

191. Nonvolatile manipulation of electronic and ferromagnetic properties of NiO–Ni epitaxial film by ferroelectric polarization charge / M.-Y. Yan, J.-M. Yan, M.-Y. Zhang, [et al.] // *Applied Physics Letters*. — 2020. — Vol. 117, no. 23. — P. 232901.
192. Strain-induced majority carrier inversion in ferromagnetic epitaxial  $\text{LaCoO}_{3-\delta}$  thin films / V. Chaturvedi, J. Walter, A. Paul, [et al.] // *Phys. Rev. Materials*. — 2020. — Vol. 4, issue 3. — P. 034403.
193. Strain control of phase transition and magnetocaloric effect in  $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$  thin films / Y. Liu, T. Ma, K. Qiao, [et al.] // *Applied Physics Letters*. — 2020. — Vol. 116, no. 8. — P. 082402.
194. Studies of electrical and magnetic properties across the Verwey transition in epitaxial magnetite thin films / A. V. Singh, A. Srivastava, J. B. Mohammadi, [et al.] // *Journal of Applied Physics*. — 2019. — Vol. 126, no. 9. — P. 093902.
195. *Skyrme, T.* A unified field theory of mesons and baryons / T. Skyrme // *Nuclear Physics*. — 1962. — Vol. 31. — P. 556—569.
196. Perspective: Magnetic skyrmions—Overview of recent progress in an active research field / K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, [et al.] // *Journal of Applied Physics*. — 2018. — Vol. 124, no. 24. — 240901.
197. *Rajaraman, R.* Solitons and Instantons. / R. Rajaraman. — Elsevier, 1981.
198. *Braun, H.-B.* Topological effects in nanomagnetism: from superparamagnetism to chiral quantum solitons / H.-B. Braun // *Advances in Physics*. — 2012. — Vol. 61, no. 1. — P. 1—116.
199. *Nagaosa, N.* Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions / N. Nagaosa, Y. Tokura // *Nature Nanotechnology*. — 2013. — Vol. 8, issue 10. — P. 899—911.
200. *Bak, P.* Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe / P. Bak, M. H. Jensen // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. — 1980. — Vol. 13, no. 31. — P. L881.
201. *Electrodynamics of Continuous Media* / L. Landau, J. Bell, M. Kearsley, [et al.]. — Elsevier Science, 2013. — (COURSE OF THEORETICAL PHYSICS).

202. Skyrmion lattice in a chiral magnet / S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, [et al.] // *Science*. — 2009. — Vol. 323, issue 5916. — P. 915—919.
203. Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet / S. D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, [et al.] // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 80, issue 5. — P. 054416.
204. *Edwards, S. F.* Theory of spin glasses / S. F. Edwards, P. W. Anderson // *Journal of Physics F: Metal Physics*. — 1975. — Vol. 5, no. 5. — P. 965.

### Публикации автора по теме диссертации

#### *В изданиях, рекомендованных ВАК*

- A1. *Белим, С. В.* Исследование влияния подложки на критическое поведение двумерного ферромагнетика / С. В. Белим, И. В. Бычков, И. В. Мальцев // *Челябинский физико-математический журнал*. — 2021. — Т. 6, вып. 2. — С. 226—236.

#### *В изданиях, входящих в международную базу цитирования Web of Science*

- A2. *Maltsev, I.* Effect of Substrate on One-Dimensional Multiferroic Properties / I. Maltsev, I. Bychkov // *Magnetochemistry*. — 2022. — Vol. 8, no. 11. — P. 158.
- A3. Phase Transition and Magnetoelectric Effect in 2D Ferromagnetic Films on a Ferroelectric Substrate / I. Bychkov, S. Belim, I. Maltsev, [et al.] // *Coatings*. — 2021. — Vol. 11, no. 11. — P. 1325.
- A4. Tuning of 2D magnets Curie temperature via substrate / S. V. Belim, I. V. Bychkov, I. Maltsev, [et al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2022. — Vol. 541. — P. 168553.

#### *В изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus*

- A5. Monte Carlo Modelling of Phase Transitions in Quasi-One-Dimensional Multiferroic / S. J. Lamekhov, D. A. Kuzmin, I. V. Bychkov, [et al.] // Phase Transitions, Critical and Nonlinear Phenomena in Condensed Matter. Vol. 845. — Trans Tech Publications Ltd, 2016. — P. 158—161. — (Materials Science Forum).

*В сборниках трудов конференций*

- A6. *Bychkov, I.* MONTE CARLO SIMULATION OF A PHASE TRANSITION IN A QUASI-ONE-DIMENSIONAL MULTIFERRROIC ON A SUBSTRATE / I. Bychkov, I. Maltsev // VIII International Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism», August 22–26, 2022, Kazan, Russia. — 2022. — P. 350.
- A7. *Бычков, И. В.* Монте-Карло моделирование одномерного мультиферрика на подложке / И. В. Бычков, И. В. Мальцев // Дни калорики в Королёве: функциональные материалы и их приложения, 16-20 августа 2022 г., г. Королёв. — 2022. — С. 129—131.
- A8. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на магнитную структуру 2D-магнетика / И. В. Мальцев, И. В. Бычков // Дни калорики в Королёве: функциональные материалы и их приложения, 27-31 мая 2023 г., г. Дербент. — 2023. — С. 83—86.
- A9. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на магнитную структуру 2D-магнетика на подложке / И. В. Мальцев, И. А. Кузнецов, И. В. Бычков // XV Международный семинар «Магнитные фазовые переходы», 10-15 сентября 2023 г., г. Махачкала. — 2023. — С. 26—28.
- A10. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на скирмионную структуру 2D-магнетика на подложке / И. В. Мальцев, И. А. Кузнецов, И. В. Бычков // XXIII Всероссийская школа - семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-23). — 2023. — С. 114.