

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Омский государственный технический университет»

На правах рукописи

Симакова Софья Сергеевна

**ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ
ПЛЕНОК МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
Тихомиров Илья Викторович
доцент, к.ф.-м.н.

Омск-2026

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Тонкие пленки с решеткой антиточек	10
1.1 Методы изготовления и магнитные свойства пленок с решетками антиточек	10
1.2 Метод компьютерного моделирования Монте-Карло и модель Изинга.....	21
1.3. Критическое поведение магнитных систем	28
1.4 Выводы.....	32
Глава 2. Магнитные свойства тонкой пленки с решеткой антиточек	33
2.1 Введение	33
2.2 Зависимость магнитных свойств пленки от размера и формы антиточек на регулярной решетке	34
2.3 Влияние толщины на процесс перемангничивания пленки с регулярной решеткой	42
2.4 Влияние распределения антиточек в решетке на фазовый переход в пленке	44
2.5 Выводы.....	51
Глава 3. Магнитные свойства бислойной тонкой пленки с решеткой антиточек ..	52
3.1 Описание модели бислойной пленки с решеткой антиточек.....	52
3.2 Зависимость температуры фазового перехода от геометрических параметров пленки.....	55
3.3 Влияние геометрических параметров пленки на процесс перемангничивания	56
3.4. Сравнение с экспериментом	63
3.5 Выводы.....	66
Глава 4. Влияние поверхностного магнетизма на тонкие ферромагнитные пленки с решеткой антиточек	68
4.1. Введение	68
4.2. Описание модели пленки с поверхностными эффектами	69
4.3. Результаты компьютерного моделирования	74
4.4 Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.....	99
4.5. Выводы.....	105

Заключение	106
Публикации автора по теме диссертации.....	110
Список использованных источников	112

Введение

Актуальность темы исследования

Тонкие ферромагнитные пленки служат основой элементной базы устройств спиновой электроники (спинтроники) [36]. Для управления потоком электронов в элементах спинтроники используется эффект гигантского магнитосопротивления. Тонкие ферромагнитные пленки используются как для создания спин-поляризованного тока, так и для спиновой фильтрации потока электронов [117]. В связи с чем актуальной является задача управления магнитными свойствами тонких пленок. Основным преимуществом тонких пленок являются низкие коэрцитивная сила и энергия перемагничивания, что позволяет управлять их состоянием с помощью слабых магнитных полей [5, 74]. Тонкие пленки используются преимущественно в составе сэндвич-систем. Для такой многослойной системы необходимо использовать пленки с различными магнитными свойствами [37]. Изменение магнитных свойств может достигаться выбором материалов, влиянием на подложку и созданием геометрических наноструктур [24, 28].

Регулярная решетка наноразмерных пор, которые принято называть антиточками (antidots) в тонкой пленке является одной из наиболее распространенных наноструктур [122]. При этом поры расположены в узлах прямоугольной или шестиугольной сетки. Такие наноструктуры формируются либо на этапе напыления пленки [120, 122], либо после ее создания с помощью травления [46, 122]. Экспериментальные исследования показывают, что изменение параметров решетки пор влияет на магнитные свойства ферромагнитной пленки: происходит сдвиг температуры Кюри, влияющий на общую намагниченность пленки, а также изменяются коэрцитивная сила и энергия перемагничивания [26]. Причем в различных материалах ширина петли гистерезиса может как увеличиваться, так и уменьшаться. Создание решетки антиточек в ферромагнитных пленках позволяет их магнитными свойствами изменять только геометрические

параметры системы: форму и размер пор, период и форму решетки [26, 51]. В связи с тем, что решетка пор обладает несколькими геометрическими параметрами, изменяющимися в широких пределах, экспериментальное изучение таких наноструктурированных пленок требует больших затрат и актуальной является задача их компьютерного моделирования. Такое моделирование позволит выявить общие закономерности изменения магнитных свойств пленки при изменении геометрических параметров решетки пор.

Метод Монте-Карло хорошо зарекомендовал себя в моделировании магнитных свойств спиновых систем, позволяющим исследовать как фазовые переходы, так и процесс перемангничивания в ферромагнитной фазе [6, 18]. Результаты компьютерного моделирования будут актуальны при разработке и проектировании устройств спинтроники.

Цель диссертационной работы состоит в исследовании методом компьютерного моделирования влияния регулярной решетки наноразмерных пор на магнитные свойства тонких ферромагнитных пленок.

Для достижения данной цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Провести компьютерное моделирование методом Монте-Карло фазовых переходов и процесса перемангничивания тонких ферромагнитных пленок с решеткой наноразмерных пор, получить фазовые диаграммы и параметры петли гистерезиса при различных значениях периода решетки и размера пор.

2. Выполнить компьютерное моделирование методом Монте-Карло фазовых переходов и процесса перемангничивания тонких бислойных ферромагнитных пленок, состоящих из магнитомягкого и магнитотвердого слоя, с регулярной решеткой наноразмерных пор, изучить зависимость температуры Кюри и параметров петли гистерезиса от периода решетки и размера пор.

3. Исследовать влияние поверхностного магнетизма на фазовые диаграммы тонких ферромагнитных пленок с регулярной решеткой пор, а также на процесс их перемангничивания.

Методы исследования: Исследование проводилось с помощью метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса и модели Изинга. Для определения магнитных характеристик системы использовалась теория конечно-размерного скейлинга.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Температура Кюри тонких ферромагнитных пленок с решеткой наноразмерных пор растет по логарифмическому закону при увеличении периода решетки и стремится к значению, характерному для непрерывных пленок. Коэрцитивная сила растет нелинейно с увеличением размера пор. Критические индексы тонких ферромагнитных пленок с решеткой наноразмерных пор изменяются по ступенчатому закону с ростом размера пор.

2. Температура Кюри бислойных ферромагнитных пленок с решеткой наноразмерных пор совпадает с температурой фазового перехода магнитотвердого слоя. Решетка пор искажает форму петли гистерезиса, в результате чего на зависимости коэрцитивной силы от отношения обменных интегралов слоев пленки присутствует минимум, расположенный в интервале от 0,6 до 0,7. Увеличение размера пор снижает коэрцитивную силу бислойных пленок с решеткой пор.

3. Поверхностный магнетизм приводит к реализации поверхностного фазового перехода в тонких ферромагнитных пленках с решеткой наноразмерных пор при толщине пленки не менее 7 моноатомных слоев, значениях поверхностного обменного интеграла выше критического значения и размера пор ниже порогового значения. Критическое значение поверхностного обменного интеграла растет с увеличением размера пор. Пороговое значение размера пор растет при увеличении толщины пленки по ступенчатому закону. При увеличении размера пор уменьшается разность между температурами фазового перехода на поверхности и в объеме системы.

4. Учет поверхностного магнетизма в ферромагнитных пленках с решеткой пор приводит к росту коэрцитивной силы, если отношение поверхностного обменного интеграла к объемному превышает критическое значение R_C , и

снижению коэрцитивной силы в обратном случае. Если отношение обменных интегралов равно критическому значению, то решетка пор не влияет на коэрцитивную силу. Критическое значение обменных интегралов убывает с увеличением толщины пленки и стремится к значению $R_c = 1,55$.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что методом моделирования Монте-Карло

1. Исследованы фазовые переходы в тонких ферромагнитных пленках с регулярной решеткой пор, а также процесс их перемагничивания. Впервые теоретически проведен анализ зависимости вида фазовой диаграммы, как от параметров массива пор, так от их формы и слабого беспорядка в их расположении;

2. Исследованы фазовые переходы в тонких бислойных ферромагнитных пленках с регулярной решеткой пор, включающих магнитомягкий и магнитотвердый слои. Впервые теоретически изучены фазовые диаграммы и характеристики процесса перемагничивания при различном отношении обменных интегралов слоев пленки и различных параметрах массива пор;

3. Проведён учет влияния поверхностного магнетизма на фазовые переходы в тонких ферромагнитных пленках с регулярной решеткой пор. Впервые теоретически изучено влияние поверхностной магнитной энергии на фазовые диаграммы тонких ферромагнитных пленок с упорядоченным массивом пор. Впервые получены условия реализации поверхностного фазового перехода в наноструктурированных тонких пленках;

4. Изучено влияние поверхностного магнетизма на процесс перемагничивания тонких ферромагнитных пленок с регулярной решеткой пор. Впервые теоретически показано, что упорядоченный массив пор может приводить к повышению коэрцитивной силы тонких ферромагнитных пленок.

Соответствие диссертации паспорту специальности

Диссертационная работа соответствует пункту 5 Паспорта специальности 1.3.3 «Теоретическая физика»: «Теория конденсированного состояния. Изучение

различных состояний вещества и физических явлений в них. Статистическая физика. Теория фазовых переходов. Физическая кинетика».

Практическая и научная значимость результатов

Научная и практическая значимость результатов состоит в теоретическом исследовании магнитных свойств ферромагнитных пленок с регулярной решеткой пор, определении зависимости намагниченности и коэрцитивной силы от периода решетки и размера пор. Результаты исследования позволяют выявить общие закономерности влияния упорядоченного массива пор на магнитные свойства ферромагнитных пленок и найти им применение в процессе проектирования и изготовления устройств спинтроники.

Исследования поддержаны Российским Научным Фондом, грант № 23-29-00108.

Апробация результатов работы: Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные эффекты в конденсированных средах», (г. Махачкала, 2023 г. и 2025 г.), Международная научная конференция «Физика и технология перспективных материалов–2023» (г. Уфа, 2023 г.), Международная научная студенческая конференция (г. Новосибирск, 2024 г.), Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г. Уфа, 2024 г.), Международная научная конференция «Физика и технология перспективных материалов–2025», (г. Уфа, 2025 г.).

Степень достоверности результатов работы: Все полученные результаты обоснованы адекватностью применяемых методов и подтверждаются сравнением с данными реальных экспериментов.

Публикации: Материалы диссертации опубликованы в 11 изданиях, из них 5 статей в журналах из списка, рекомендованного ВАК, включая 2 статьи в журналах, индексируемых в международных базах Scopus (Q2) и Web of Science, 6 публикаций в материалах конференций.

Структура и объем диссертации: Диссертация содержит: введение, 4 главы, заключение и библиографический список. Общий объем диссертации 125 страниц, библиографический список содержит 122 источника.

Личный вклад автора: Все публикации выполнены в соавторстве с научным руководителем Тихомировым И.В., а также Белимом С.В. и Бычковым И.В. Формулировка цели исследования и постановка задач исследования выполнены совместно с научным руководителем. Разработка программного комплекса для расчетов, компьютерный эксперимент, обработка его результатов и сравнение с данными реальных экспериментов выполнены соискателем лично. Обсуждение результатов компьютерного моделирования и написание научных статей выполнено совместно с соавторами.

Глава 1. Тонкие пленки с решеткой антиточек

1.1 Методы изготовления и магнитные свойства пленок с решетками антиточек

Тонкие пленки с решеткой антиточек являются одним из новых перспективных магнитных материалов. Магнитные решетки антиточек — это двумерные наноструктуры, которые содержат упорядоченную периодическую решетку пор в непрерывной пленке из магнитного материала. Такая особенность морфологии вызывает изменения в распределении поля размагничивания, которое может модифицировать магнитные свойства непрерывной тонкой пленки. Решетка антиточек вносит изменения в механизм реверсирования намагниченности [116], переключающее поле [43] и внутреннюю магнитную анизотропию [16]. Кроме того, варьирование геометрических параметров решетки, размеров и формы отверстий позволяют регулировать магнитные свойства пленки [40, 50, 99, 113]. При этом отверстия могут вести себя как центры, препятствующие смещению стенок магнитных доменов [43]. В последнее время структуры с решетками антиточек являются актуальными объектами фундаментальных исследований магнитных материалов и основой для практических разработок в области хранилищ информации высокой плотности [37, 53], устройств спинтроники [104], логических схем [122].

Тонкие пленки с решетками антиточек изготавливают из материалов, обладающих сильными ферромагнитными свойствами: чаще всего это Fe, Co, Ni, Permalloy ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$) [16, 26, 40, 51, 98, 115], также проводятся исследования с использованием Fe_3O_4 , $\text{Co}_{80}\text{Cr}_{20}$, Dy-Fe [36, 81, 97]. В качестве подложек используются различные материалы, выбор которых зависит от методов напыления пленки и создания решетки антиточек.

Толщина пленок без учета подложек, как правило, находится в пределах от 10 до 50 нм, для используемых материалов это соответствует толщине нескольких моноатомных слоев. Форма антиточек редко является изменяемым параметром и обычно выбирается круглой или квадратной. Форма ячейки решетки в большинстве случаев экспериментальных исследований выбирается квадратной [40, 81] или гексагональной [26, 36, 81, 97, 99, 116] (Рис. 1.1).

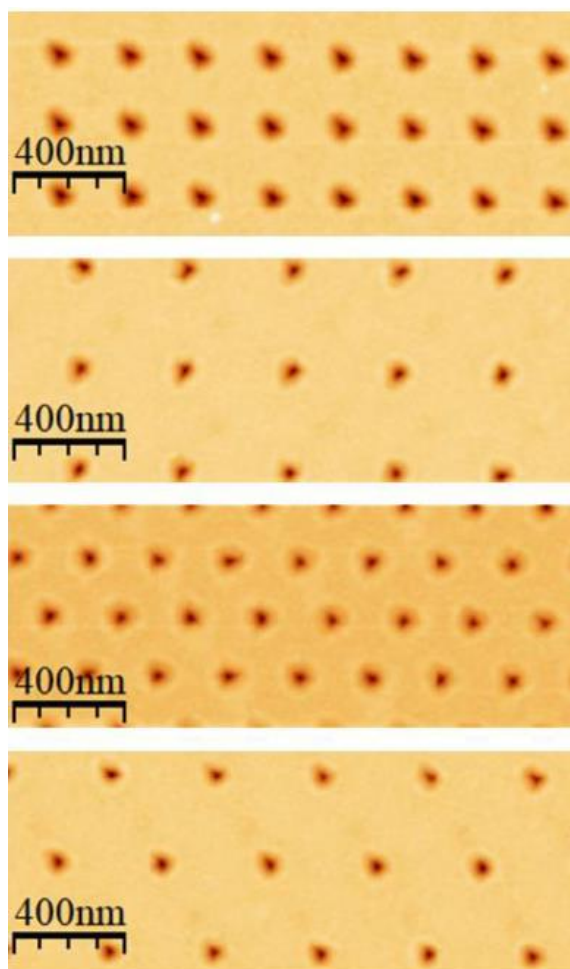


Рисунок 1.1 — Изображения АСМ, показывающие расположение антиточек в квадратной и гексагональной решетках с различным периодом на пленке Со [51].

Во многих работах, посвященных этим наноструктурированным материалам, основными параметрами являются диаметр пор, период решетки или их отношение. Диаметр пор изменяется в интервале от 30 нм до 200 нм, однако существуют исследования антиточек и микроскопических размеров [8, 11, 40, 97].

Период же решетки (расстояние между двумя ближайшими антиточками), как правило, варьируется от 100 нм до 1000 нм.

Методика изготовления пленок с решетками антиточек напрямую влияет на структуру и свойства создаваемого материала. Высокая точность при изготовлении пористых тонких пленок до сих пор является сложной задачей. Методики изготовления пористых двумерных материалов можно разделить на две группы, в зависимости от «направленности воздействия» на подложку: восходящие и нисходящие [122].

Травление ионным пучком гелия — это нисходящий метод, основанный на вытравливании необходимых пор на двумерной непрерывной пленке. Данный метод позволяет достигать высокой точности травления, обеспечивает контроль кристаллической структуры и шероховатости кромок получаемых отверстий. Данная технология применяется для протравливания необходимых областей плоской пленки, избирательного введения точечных дефектов или ионов для модификации кристаллической структуры и изменения физических свойств. Современные методы позволяют получать поры диаметром меньше 10 нм [35, 46, 57, 75, 110] (Рисунок 1.2).

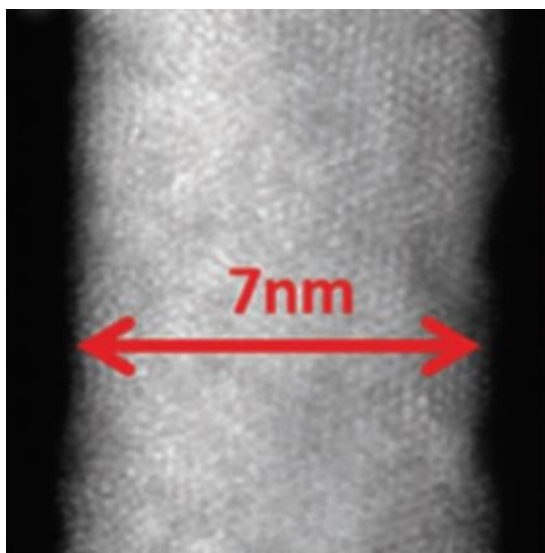


Рисунок 1.2 — Лента из кристаллического MoS₂ шириной 7 нм с решеткой антиточек, нанесенной с помощью ионного пучка He⁺ [75].

Данная технология создания решетки антиточек в тонкой пленке обладает большой точностью, однако не применима в крупномасштабном производстве из-за ее трудозатратности и сложности в масштабировании.

Метод самосборки является восходящим методом и заключается в том, что структурные единицы вещества организуются спонтанно посредством разных видов взаимодействий, образуя упорядоченную стабильную структуру. В работе [101] были синтезированы тонкие магнитомягкие наноструктурированные пленки, состоящие из рядов выращенных полимерных цепей. Основными факторами, влияющими на конечную морфологию, являются структура и свойства исходных компонентов и используемой подложки. Данная технология допускает масштабирование для промышленного производства материалов.

Метод химического осаждения из жидкой фазы является восходящим подходом. Данный метод позволяет получать наноструктурированные металлоуглеродные пленки (например, FeCo-C и Fe-Ni-C) с контролируемыми магнитными свойствами, такими как локальная магнитная анизотропия [3, 4]. Основным преимуществом является простота и низкая стоимость процесса, не требующего сложного вакуумного оборудования. Ключевой задачей при использовании метода является точный подбор химического состава раствора и параметров осаждения (температура, pH) для управления размером нанокристаллов и фазовым составом покрытия. Следует отметить, что данный метод совместим с различными типами подложек и позволяет формировать пленки на крупногабаритных деталях сложной формы.

Метод плазменного химического осаждения из паровой фазы относится к восходящим методам. Исходный газ ионизируется с образованием плазмы, а затем осаждается на подложку. По сравнению с традиционным методом химического осаждения из паровой фазы, плазма переносит большее количество высокоэнергетических электронов, обеспечивающих большую эффективность реакций [2]. Первоначально данная методика использовалась для самосборки равномерных вертикальных графеновых наностенок. В качестве подложки

используются мембраны из пористого оксида алюминия. Острые края мембраны работают как точки роста и способствуют зародышеобразованию осаждаемого вещества. В частности, упоминаемый метод позволяет формировать наноструктурированные пленки путем введения кислородных вакансий в кристаллическую структуру [120].

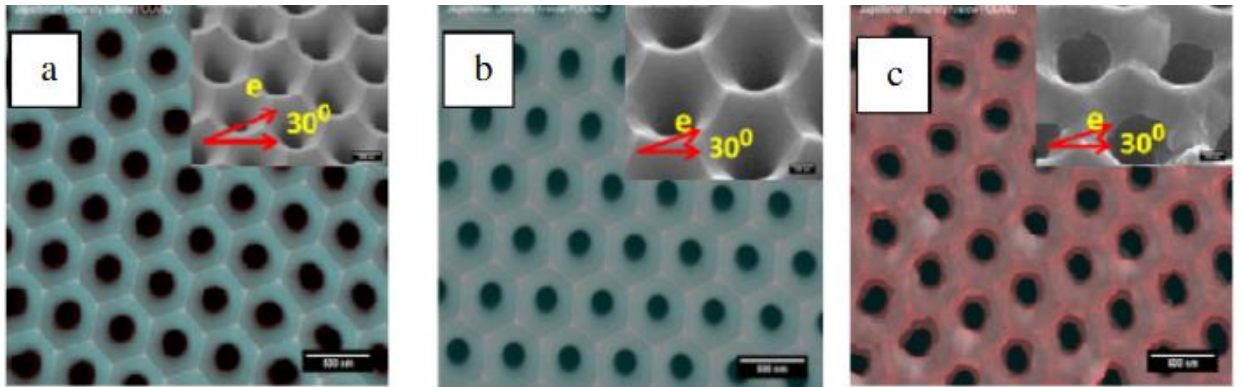


Рисунок 1.3 — СЭМ-изображения решетки антиточек в пленке FePd, полученной осаждением из паровой фазы сразу после осаждения и отожженных при различных температурах. [67].

Нанопечатная литография является нисходящим методом и выделяется тем, что относится к механическим методам. Данный метод может обеспечить промышленное производство крупномасштабных микро- или наномассивов пор с низкой стоимостью. Метод применяется для изготовления наноструктурированных магнитных структур для современных магнитных носителей информации [106]. Основной сложностью является производство шаблона для литографии с наибольшим разрешением и низкой шероховатостью краев. Следует отметить, что этот метод совместим с другими типичными методами подготовки наноструктурированных материалов [25, 76, 77].

Метод сайт-селективного роста реализует прямой синтез двумерных материалов на заранее заданных участках зародышеобразования. Подложкой для пленок с решеткой антиточек могут служить предварительно сформированные металлические слои, ростовые зародыши и другие материалы. Структуры для зародышеобразования создаются другими вспомогательными методами, например,

электронно-лучевой литографией или термическим испарением. Места зародышеобразования предотвращают рост материалов в случайных местах, что позволяет контролировать морфологию создаваемого наноматериала (Рисунок 1.4).

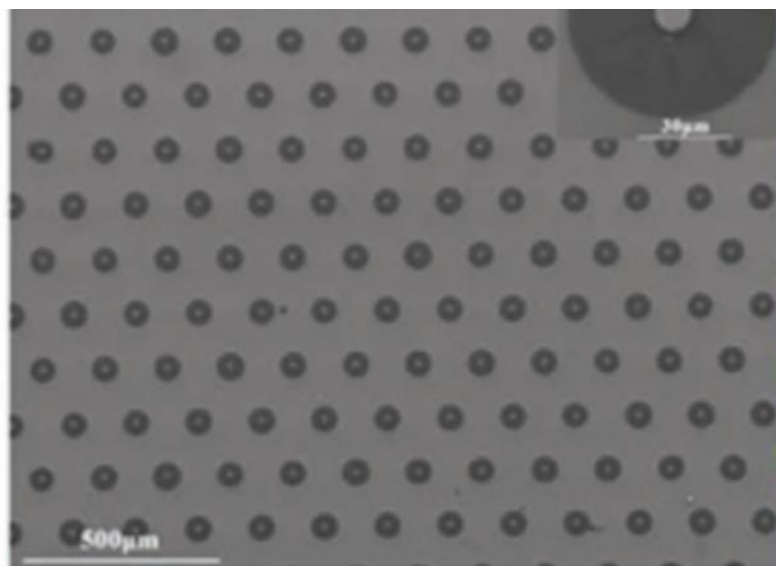


Рисунок 1.4 — Пленка из MoS_2 с порами, изготовленная методом сайт-селективного роста [109].

Метод наносферной литографии — это восходящий метод, в котором используется процесс самоорганизации латексных наносфер в двумерные массивы за счет поверхностного натяжения и электростатического взаимодействия [116]. Такие массивы наносфер могут служить литографической маской для травления (Рисунок 1.5). После покрытия наносфер каким-либо материалом для травления используют разные методы воздействия, например, плазмой O_2 . После этого наносферы удаляются. Благодаря точечному контакту между наносферами и двумерными материалами формируется необходимый рисунок. Диаметр наносфер и расстояние между ними определяют параметры решетки антиточек.

Данный метод синтеза пленок с решетками антиточек является наиболее эффективным, так как требует наименьших технических и временных затрат, а также позволяет варьировать многие параметры структуры. Однако он требует доработки первого этапа синтеза — технологии нанесения наносфер в виде решетки нужной геометрии.

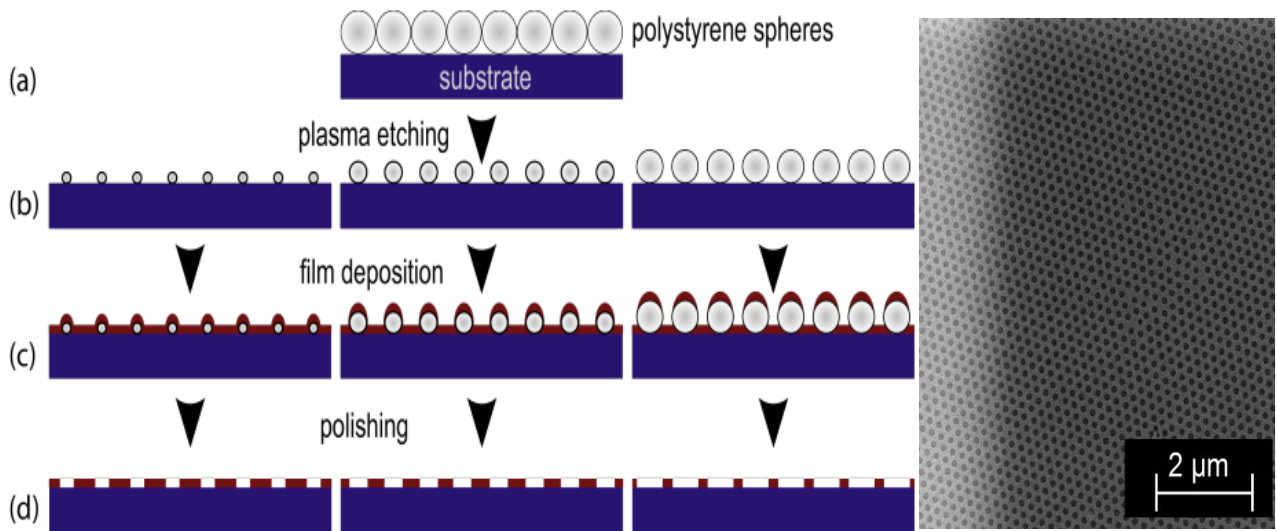


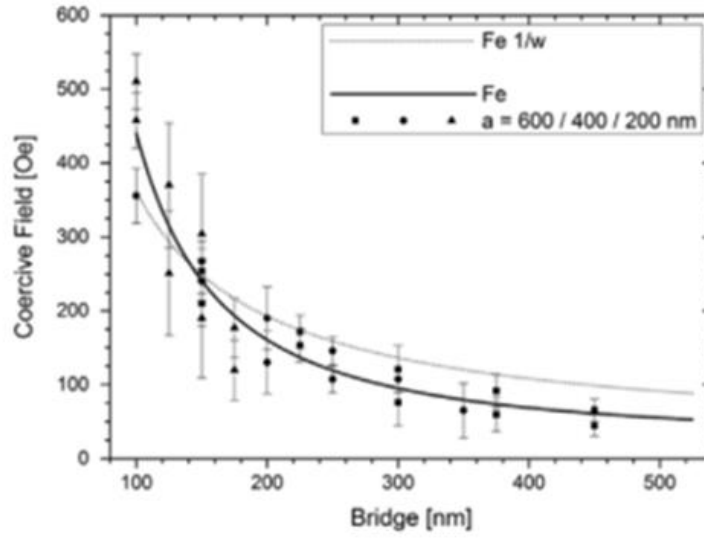
Рисунок 1.5 — Схема процесса наносферной литографии и изображение пленки Fe с решеткой пор [116].

Решетки антиточек вносят значительные изменения в магнитные свойства поведение тонких ферромагнитных пленок [98, 114]. Было показано, что увеличивается магнитостатическая энергия структуры. Это изменение связывают с появлением магнитных полюсов на поверхностях пор. Магнитостатическая энергия, связанная с решеткой пор, повышается с увеличением толщины пленки. При увеличении толщины пленки до размеров, при которых уравнивается энергия магнитных полюсов на поверхности пленки, изменяется направление вектора намагниченности. Если размеры поры больше, чем толщина пленки, то направление намагниченности остается в плоскости пленки. Для образцов, в которых толщина пленки была близка к средним диаметрам пор, магнитостатическая энергия, накапливаемая поверхностными полюсами в плоскости пленки, и энергия, обусловленная магнитными полюсами на поверхности пор, имеют один порядок величины. По мере увеличения толщины пленки результирующая намагниченность поворачивается в направлении нормали к плоскости пленки. Такой поворот уменьшает суммарную магнитостатическую энергию системы.

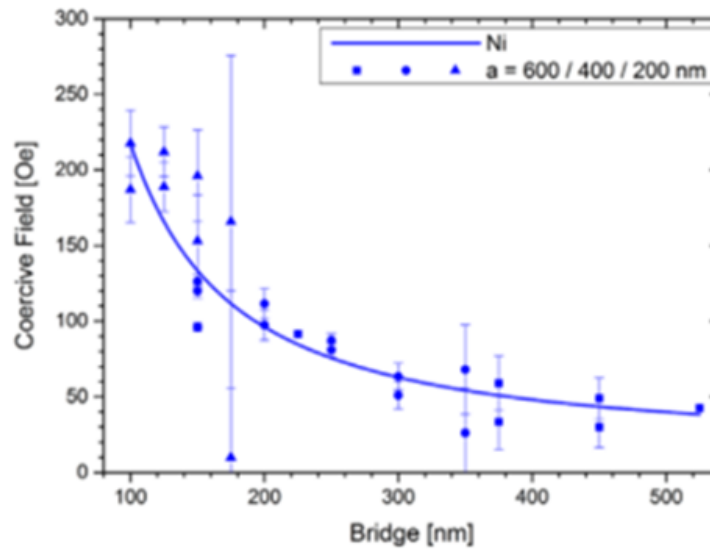
Магнитные свойства ферромагнитных пленок с решеткой антиточек зависят не только от размеров пор, но и геометрии решетки [24, 40, 43, 50, 82, 87, 99, 113, 116]. Основное влияние на коэрцитивную силу оказывает расстояние между порами [24, 40, 50, 82, 87, 99]. Результаты исследований [116] показывают тесную связь между магнитными свойствами структуры и морфологией решетки антиточек, пример таких результатов приведен на рисунке 1.6. Существует также зависимость от диаметра пор и ферромагнитного материала, из которого изготовлена пленка. Коэрцитивная сила в пленке с решеткой антиточек увеличивается по сравнению со сплошными пленками обратно пропорционально расстоянию между краями пор. Причем эта закономерность наблюдается для всех структур, независимо от метода синтеза пленки и геометрии решетки.

Также в работе [43] показано, что происходит развитие нанозерен в узких областях между двумя порами. Этот процесс предполагает наличие независимых инверсий магнитного поля, вызванных различием процессов роста двух локальных областей. Магнитные домены становятся более изолированными по мере увеличения диаметра пор из-за разделения нанозерен и роста внутреннего слоя стенки. Кроме того, в порах обнаружены магнитные вихревые явления, вызванные неоднородной намагниченностью в области закрепления доменных стенок, усиленные внеплоскостными магнитными моментами.

(a)



(b)



(c)

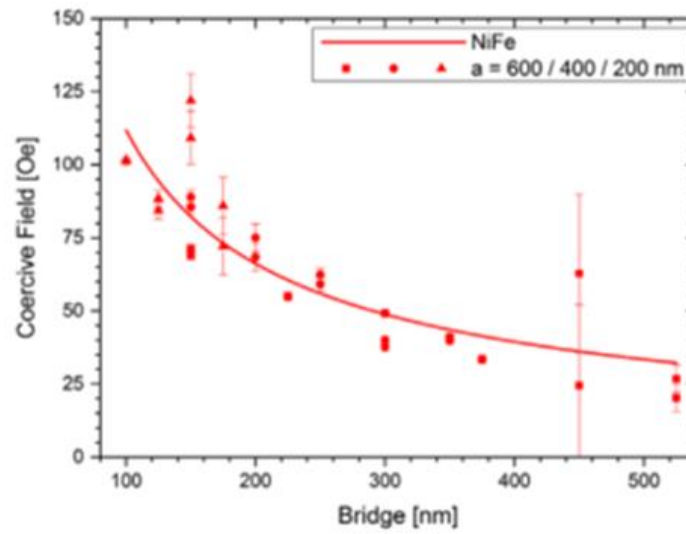


Рисунок 1.6 — Зависимость коэрцитивной силы от ширины перемычки между соседними порами для пленок из Fe (a), Ni (b) и NiFe (c) [116]

В работе [82] для одновременного учета диаметра и расстояния между порами был использован параметр, показывающий процент площади ферромагнитных областей вокруг пор. Конкретный анализ механизма перемагничивания, основанный на изучении угловой зависимости параметров гистерезиса и визуализации процессов перемагничивания в поликристаллических структурах, позволил предположить, что перемагничивание происходит с краев структур.

Микромагнитное моделирование тонких пленок с решеткой антиточек [55] показывает, что магнитные свойства структуры напрямую зависят от формы решетки. Были показаны большие изменения коэрцитивной силы при изменении размера отверстий для отверстий разного диаметра, расположенных в решетках разной геометрии. Наибольшее значение коэрцитивной силы по сравнению с другими решетками наблюдалось для решетки с треугольными ячейками. Изменения в процессе перемагничивания менее выражены в случае хаотического и квазикристаллического упорядочения, что обусловлено меньшей плотностью пор на единицу площади. В системах с квадратной решеткой антиточек возможно эффективное образование и исчезновение центров задержки доменных стенок.

В работе [64] показано, что стабилизирующее действие решетки антиточек приводит к образованию структур, неустойчивых в сплошной пленке. В частности, в пленках могут реализовываться гексагональная, сотовая или прямоугольная решетка магнитных скирмионов. Магнитные скирмионы в пленке с гексагональной решеткой антиточек удерживаются магнитостатическим полем. Распределение намагниченности внутри скирмионов сильно неоднородно по толщине. Кроме этого, в нулевом магнитном поле могут генерироваться два типа доменных структур, аналогичных сотовой доменной структуре в однородной пленке. В системе также может быть реализована доменная структура, соответствующая полосным доменам однородной магнитной пленки.

Явления коллективного спин-волнового возбуждения в двумерных периодических массивах антиоточек в пленке Co с разными периодами были исследованы методом ферромагнитного резонанса в работе [66]. Обнаружено сильное затухание моды однородного ферромагнитного резонанса в массиве антиоточек по сравнению с резонансной модой сплошной пленки. Это затухание сопровождается дополнительным многопиковым поглощением в широком диапазоне магнитных полей. Спектры ферромагнитного резонанса сильно зависят от ориентации внешнего поля относительно массива антиоточек. Резонансные моды также зависят от геометрии вытянутых отверстий и угла приложения внешнего магнитного импульса [93]. Таким образом, изменением геометрии решетки можно контролировать не только величину резонансных пиков, но и их количество. В работе [26] исследована эволюция спиновых волн в NiFe с решеткой антиоточек. Обнаруживается резкая модуляция магнетонных мод при изменении периодичности решетки.

В работах [16, 51] исследовано поведение бислойных магнитных пленок, состоящих из магнито жесткого и магнитомягкого слоев с решетками пор. Было определено [16], что в таких бислойных системах морфология решетки пор индуцирует внеплоскую составляющую намагниченности. Такая компонента сильнее для упорядоченных массивов, чем для неупорядоченных. Влияние этого явления на глобальное поведение жестких/мягких бислойных пленок зависит от толщины мягкого слоя. Также было исследовано влияние метода синтеза структур на их магнитные свойства [16]. Наноматериалы, изготовленные нисходящими методами, демонстрируют более высокое значение коэрцитивной силы, чем структуры, изготовленные восходящими методами. Вероятно, наличие дальнего порядка приводит к более эффективному закреплению доменных стенок и позволяет адаптировать магнитные свойства структуры.

1.2 Метод компьютерного моделирования Монте-Карло и модель Изинга

Метод Монте-Карло используется для компьютерного моделирования сложных систем. Этот метод служит основой для алгоритмов, использующих псевдослучайные числа. Метод Монте-Карло активно используется в статистической физике для моделирования систем с большим количеством степеней свободы, для которых точные вычисления усредненных значений термодинамических величин представляет собой сложную задачу [6, 17, 34].

Основная идея метода Монте-Карло состоит в замене прямого многократного интегрирования в выражениях, определяющих средние значения функций от координат на усреднение по ансамблю частиц. Вычисляемые интегралы имеют следующий обобщенный вид:

$$\bar{F} = A \int_V F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \exp\left(-\frac{U_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{k_B T}\right) d\vec{r}_1, \dots, d\vec{r}_N, \quad (1.1)$$

где A – нормировочный коэффициент, $F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ – функция состояния системы, $U_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ – энергия взаимодействия частиц системы, N – число частиц в системе.

Вместо трудоемкой операции интегрирования производится усреднение по множеству случайных конфигураций системы, образующих цепь Маркова с постоянными вероятностями переходов. Рассмотрим цепь Маркова, в которой все конфигурации образуют один эргодический класс, и вероятности перехода p_{ij} из состояния i в состояние j удовлетворяют условиям нормировки и обратимости:

$$\sum_j p_{ij} = 1, \quad i = 1, \dots, s; \quad (1.2)$$

$$p_{ij} \exp\left(-\frac{U_i}{k_B T}\right) = p_{ji} \exp\left(-\frac{U_j}{k_B T}\right), \quad (1.3)$$

где s – число всех возможных состояний системы. В таком случае, при достаточной продолжительности цепи, частота появления какого-либо состояния стремится к

величине, пропорциональной бoльцмановскому множителю $\exp(-U_i/k_B T)$. Сходимость этой последовательности не зависит от выбора начальной конфигурации. Средние значения функций состояния стремятся к средним по каноническому ансамблю Гиббса для данной системы.

Реализация численного моделирования методом Монте-Карло сталкивается с рядом трудностей. Объем вычислений не позволяет качественно моделировать системы с количеством частиц порядка числа Авогадро. Для того, чтобы сгенерировать достаточно длинную Марковскую цепь и уменьшить количество статистических ошибок, при разумных ограничениях на время расчетов, необходимо рассматривать системы, состоящие из нескольких сотен частиц. Однако такой ансамбль не позволяет корректно описывать поведение реальных физических систем. Для решения данной проблемы вводятся периодические граничные условия: вся область пространства разбивается на равные ячейки, одна из которых является «основной». Расчеты производятся только для «основной ячейки», и поведение системы в ней дублируется на все остальные области рассматриваемого пространства. При этом предполагается, что вычисление энергии любой конфигурации производится суммированием взаимодействий всех частиц системы в целом, а не только взаимодействий частиц основной ячейки.

При использовании периодических граничных условий учитывается лишь часть из возможных состояний системы. Статистические веса неучтенных состояний, которые мало отличаются от учтенных, близки к весам рассмотренных конфигураций. Поэтому можно считать, что производится их приблизительный учет. Если же неучтенные конфигурации сильно отличаются от рассмотренных, значит они представляют собой маловероятные флуктуации, вклад которых в средние значения искомых величин пренебрежимо мал.

Модель Изинга, предложенная в 1925 году Эрнстом Изингом и Вильгельмом Ленцем, служит основой для моделирования магнитных систем [31, 49, 59, 73, 103, 105]. Данная модель имеет точное решение два одномерного и двумерного случая при отсутствии внешнего магнитного поля [100]. Модель Изинга используется для

моделирования поведения материалов с легкой осью намагничивания (DyPO_4 , CoCs_3Cl , CoRb_3Cl_5 , Fe_2As_2 и др.) [78, 115].

В основе модели Изинга лежит упрощение, предполагающее анизотропность магнитных моментов частиц. Каждой вершине кристаллической решетки сопоставляется частица со спином S_i . Спины ориентированы вдоль одной оси и могут иметь два направления. Первое положение принято называть направлением «вверх» ($S_i = 1/2$), а второе – «вниз» ($S_i = -1/2$). Спины частиц взаимодействуют с помощью обменного взаимодействия. Обменное взаимодействие является парным и определяется произведением спинов частиц. Интенсивность обменного взаимодействия определяется обменным интегралом J . Гамильтониан системы H вычисляется как сумма парных взаимодействий спинов частиц и взаимодействием с внешним полем:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu_B h_0 \sum_i S_i. \quad (1.4)$$

Здесь S_i – спины частиц, J – обменный интеграл взаимодействия между частицами, h_0 – напряженность внешнего магнитного поля, μ_B – магнетон Бора.

Первое слагаемое описывает парное взаимодействие между двумя соседними спинами S_i и S_j . Обменное взаимодействие быстро убывает с расстоянием, поэтому в первом слагаемом достаточно выполнить суммирование по ближайшим соседям выбранного спина. Второе слагаемое описывает взаимодействие спинов частиц с внешним магнитным полем.

Намагниченность системы вычисляется как среднее значение спина на одну частицу:

$$m = \left(\sum_{i=1}^N S_i \right) / N. \quad (1.5)$$

Здесь N – количество частиц в системе.

Аналогично вычисляется средняя энергия, приходящаяся на одну частицу:

$$E = H/N. \quad (1.6)$$

H – значение гамильтониана для данной конфигурации.

Для ферромагнитных материалов обменный интеграл является положительной величиной ($J > 0$). Минимум энергии системы достигается при сонаправленности спинов частиц, при этом произведение спинов частиц равно $1/4$ ($S_i S_j = 1/4$). Тепловое движение частиц играет роль разупорядочивающего фактора. При низких температурах энергия обменного взаимодействия больше энергии теплового движения и система находится в упорядоченной ферромагнитной фазе. При высоких температурах энергия теплового движения больше энергии обменного взаимодействия, что приводит к реализации парамагнитной фазы.

При компьютерном моделировании используются безразмерные величины для температуры T и напряженности магнитного поля h :

$$T = \frac{k_B t}{J}, \quad h = \frac{\mu_B h_0}{J}, \quad (1.7)$$

где t – термодинамическая температура системы.

Моделирование всегда выполняется для систем с конечным размером L . Полноценные фазовые переходы второго рода реализуются только в бесконечных системах. Для того, чтобы избежать влияния конечных размеров на результаты моделирования, используется теория конечноразмерного скейлинга [33]. Основная идея этой теории состоит в моделировании систем с различными размерами L и вычислении для них физических параметров. Параметры бесконечной системы определяются с помощью аппроксимации значений для конечных систем различного размера.

Один из самых точных методов определения температуры фазового перехода основан на использовании кумулянтов Биндера четвертого порядка [19].

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (1.8)$$

Асимптотическое поведение кумулянтов можно определить следующим образом:

$$\begin{cases} U \rightarrow \frac{2}{3} \text{ при } T \rightarrow 0, \\ U \rightarrow 0 \text{ при } T \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1.9)$$

Наиболее важным свойством кумулянтов Биндера является независимость от размеров системы в точке фазового перехода. Поэтому для систем с различным линейным размером строятся графики зависимости кумулянтов Биндера от температуры. Все эти графики будут пересекаться в одной точке. Точка пересечения соответствует температуре фазового перехода T_c .

Для определения величины коэрцитивной силы проводятся следующие действия. Устанавливается начальное значение напряженности магнитного поля h_{max} , после чего система приводится в равновесное состояние с помощью большого числа шагов Монте-Карло на спин. После этого магнитное поле изменяется на небольшой шаг Δh , и система вновь приводится в состояние равновесия. При малом изменении магнитного поля требуется небольшое количество шагов Монте-Карло. Последовательными шагами Δh магнитное поле уменьшается до значения $-h_{max}$. После этого магнитное поле увеличивается обратно до значения h_{max} с тем же шагом Δh .

Поскольку метод Монте-Карло является статистическим, то необходимо проделывать несколько измерений для каждой конфигурации, а потом проводить по ним усреднение. Для каждого значения напряженности магнитного поля вычисляется намагниченность системы. График зависимости намагниченности от напряженности магнитного поля представляет собой петлю гистерезиса. Точка пересечения петли гистерезиса с осью абсцисс определяет коэрцитивную силу системы.

Для исследования фазовых переходов в спиновых системах с помощью метода Монте-Карло широкое распространение получил алгоритм Метрополиса [10, 31]. Алгоритм Метрополиса применяется для генерации новых конфигураций системы случайным образом. В алгоритме Метрополиса каждая следующая конфигурация формируется из предыдущего состояния с некоторой вероятностью. Вероятность перехода в новое состояние зависит от изменения энергии системы.

Все состояния упорядочены по времени и разделены промежутком τ_0 . Для релаксационных моделей вероятность P_n состояния с номером n зависит от момента времени t и описывается уравнением:

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = - \sum_{n \neq m} (P_n(t)W_{n \rightarrow m} - P_m(t)W_{m \rightarrow n}), \quad (1.10)$$

где $P_n(t)$ — вероятность нахождения система в состоянии n в момент времени t , $W_{n \rightarrow m}$ — скорость перехода из состояния n в состояние m . Если система находится в равновесии, то вероятность каждого состояния не зависит от времени и выполняется равенство $\partial P_n(t)/\partial t = 0$. В этом случае выполняется равенство, называемое «детальный баланс»:

$$P_n(t)W_{n \rightarrow m} = P_m(t)W_{m \rightarrow n}. \quad (1.11)$$

Вероятность перехода системы в n -е состояние определяется энергией E_n системы в этом состоянии:

$$P_n(t) = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{Z}, \quad (1.12)$$

где Z — статистическая сумма. В алгоритме Метрополиса вероятность следующего состояния вычисляется из вероятности предыдущего состояния. В этом случае приходится оперировать отношениями вероятностей, и статистическая сумма сокращается. Отношение вероятностей зависит только от разности энергий в двух состояниях.

$$\Delta E = E_n - E_m. \quad (1.13)$$

В качестве скорости перехода может быть использовано любое выражение, удовлетворяющее уравнению детального баланса. Наибольшее распространение получила функция, зависящая от разности энергий.

$$W_{n \rightarrow m} = \begin{cases} \tau_0^{-1} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), & \Delta E > 0, \\ \tau_0^{-1}, & \Delta E \leq 0, \end{cases} \quad (1.14)$$

где τ_0 — время перехода в новое состояние. Величина τ_0 играет роль единицы времени и при компьютерном моделировании выбирается равным единице ($\tau_0 = 1$).

Применение алгоритма Метрополиса можно описать в виде следующей последовательности шагов. В качестве начального состояния используется случайно сгенерированная конфигурация системы. На одном шаге алгоритма предпринимается попытка перехода к новой конфигурации. При этом вычисляется энергия старой и новой конфигурации. Если разница энергий (ΔE) между новой и текущей конфигурациями отрицательна, то переход энергетически выгоден, и новая конфигурация принимается как текущее состояние системы. Если разность энергий положительна, генерируется псевдослучайное число r ($0 < r < 1$). Новая конфигурация принимается, если вероятность перехода в новую конфигурацию удовлетворяет следующему неравенству:

$$e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} > r. \quad (1.15)$$

В противном случае новая конфигурация отклоняется, и конфигурация системы на данном шаге алгоритма Метрополиса не изменяется.

Применительно к модели Изинга алгоритм Метрополиса может быть описан следующей последовательностью шагов:

- 1) Сформировать начальную конфигурацию спинов случайным образом.
- 2) Выбрать узел с номером i .
- 3) Рассчитать изменение энергии ΔE , происходящее при перевороте спина в узле i .
- 4) Если $\Delta E < 0$, принять новую конфигурацию и перейти к следующему узлу (шаг 2).
- 5) Если $\Delta E \geq 0$, то сгенерировать случайное число r ($0 < r < 1$).
- 6) Если $r < \exp(-\Delta E/k_B T)$, то принять новую конфигурацию, иначе вернуть спин в исходное состояние.
- 7) Перейти к следующему узлу (шаг 2).

После применения этой последовательности шагов к нужному количеству спинов, определяются параметры системы и добавляются к вычисляемым средним значениям. Случайное число r должно иметь равномерное распределение в интервале $(0,1)$. Качество применяемого генератора псевдослучайных последовательностей оказывает существенное влияние на конечный результат. Поэтому применяемый генератор случайных чисел должен иметь максимально большой период и низкую корреляцию между членами последовательности. Также важной характеристикой модели, использующей алгоритм Метрополиса, является количество шагов Монте-Карло на спин (MCS). Один шаг соответствует попытке переворота спина в одном узле. Средние значения физических величин вычисляются как среднее арифметическое по различным конфигурациям системы.

1.3. Критическое поведение магнитных систем

Вблизи точки фазового перехода наблюдается критическое поведение спиновых систем. Параметром порядка для таких систем служит намагниченность. В точке фазового перехода параметр порядка монотонно растет. При этом вторые производные от энергии, такие как теплоемкость, сжимаемость, коэффициент температурного расширения, изменяются скачкообразно [7].

Вблизи температуры фазового перехода наблюдается область критического поведения. За счет неустойчивости системы, в этой области важную роль играют крупномасштабные долгоживущие флуктуации. Под их влиянием термодинамические функции демонстрируют расходимость при приближении температуры системы к температуре Кюри ($|T - T_C| \rightarrow 0$). Такое поведение термодинамических параметров принято аппроксимировать степенными функциями. Показатели степени получили название критических индексов. Критические индексы вводятся для нескольких термодинамических параметров.

Первый критический индекс вводится для радиуса корреляции:

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}, \quad (1.16)$$

здесь ν – статический критический индекс радиуса корреляции системы.

Теплоемкость системы описывается критическим индексом α :

$$C \propto |T - T_c|^{-\alpha}. \quad (1.17)$$

Поведение параметра порядка определяется критическим индексом β :

$$m \propto |T - T_c|^{-\beta}. \quad (1.18)$$

Для магнитной восприимчивости вводится критический индекс γ :

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} \propto |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (1.19)$$

Не все критические индексы являются независимыми, они связаны скейлинговыми соотношениями [7]:

$$\begin{cases} 2 - \alpha = D\nu \\ D\nu = 2\beta + \gamma \end{cases} \quad (1.20)$$

При компьютерном моделировании одной из главных проблем является учет конечных размеров системы на критическое поведение. Данная проблема решается с помощью теории конечноразмерного скейлинга [33]. Данная теория дает возможность экстраполировать данные, полученные методом Монте-Карло для систем конечного размера с периодическими граничными условиями, на систему с бесконечными линейными размерами $L \rightarrow \infty$. Основная идея теории конечноразмерного скейлинга состоит в том, что свободную энергию системы при температуре T , близкой к критической температуре T_c , можно представить в следующем виде:

$$F(T, L) \propto L^{-D} F_0 \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} L^{\frac{1}{\nu}} \right). \quad (1.21)$$

Здесь $T_c = T_c(L = \infty)$, D – размерность системы, L – линейный размер системы. Из этого утверждения получаются аналогичные зависимости для теплоемкости, магнитной восприимчивости и намагниченности системы:

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0 \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} L^{1/\nu} \right) \quad (1.22)$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0 \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} L^{\frac{1}{\nu}} \right) \quad (1.23)$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0 \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} L^{\frac{1}{\nu}} \right) \quad (1.24)$$

Применение теории конечноразмерного скейлинга к различным моделям, в том числе к модели Изинга было показано в различных работах [6]. Для определения критических индексов определяется критическая температура T_c , а затем в двойном логарифмическом масштабе строятся зависимости m и χ от линейных размеров решетки при $T = T_c$. Пример такой зависимости приведен на рисунке 1.7.

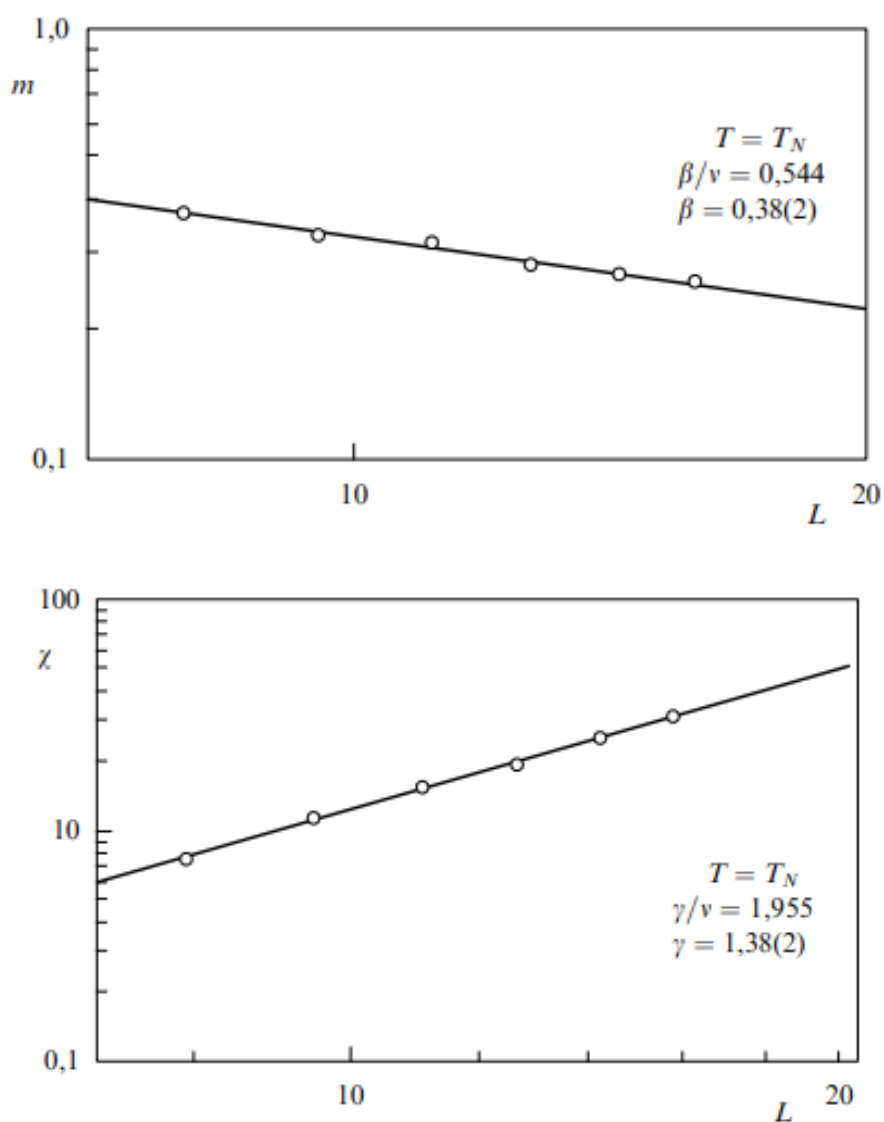


Рисунок 1.7 – Зависимости намагниченности m и магнитной восприимчивости χ от линейного размера системы для $T = T_c$ для Cr_2O_3 [6].

По наклону прямой определяются соотношения β/ν и γ/ν , значение $\nu = 0,63$ универсально для трехмерных систем в рамках модели Изинга [20], отсюда находятся два критических индекса. Остальные критические индексы могут быть определены из скейлинговых соотношений. Для аппроксимации зависимости максимальной теплоемкости от линейных размеров применяется следующее соотношение [9]:

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - aL^{\frac{\alpha}{\nu}}, \quad (1.25)$$

где a – некоторый коэффициент. При использовании данной зависимости можно вычислить критический индекс системы α (Рисунок 1.8).

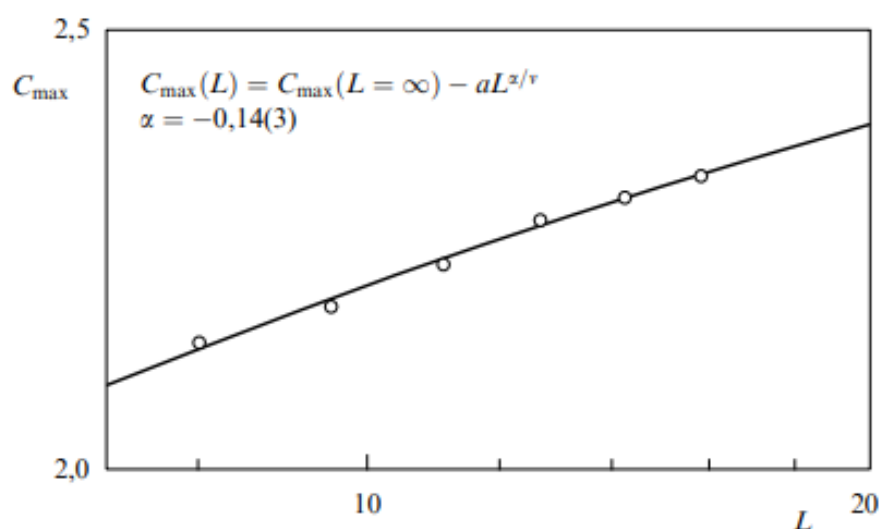


Рисунок 1.8 – Зависимости намагниченности C_{max} от линейного размера системы для Cr_2O_3 [6].

В Таблице 1 приведены для сравнения значения критических индексов, полученных в теории Ландау с индексами, полученными для модели Изинга. Можно заметить, что критические индексы различаются, так как теория Ландау не учитывает критические явления вблизи точки фазового перехода.

Таблица 1 – Значение критических индексов в теории Ландау и модели Изинга [1].

	α	β	γ	ν
Теория Ландау	0	1/2	1	1/2
Модель Изинга $D = 2$	0	1/8	7/4	1
Модель Изинга $D = 3$	0,105	0,312	1,2385	0,6305

Критические индексы обладают универсальностью, они не зависят от вида вещества. Значения критических индексов определяются только симметрией системы.

1.4 Выводы

На основании изученной информации можно сделать следующие выводы:

1. Наличие решетки антиточек в тонкой пленке позволяет регулировать магнитные свойства структуры. Изменяя размеры и расположение антиточек возможно оказывать влияние на критическую температуру и коэрцитивную силу пленки.

2. Современные технологии получения тонких пленок с решеткой антиточек позволяют варьировать размеры пор, их форму и период расположения.

Глава 2. Магнитные свойства тонкой пленки с решеткой антиточек

2.1 Введение

Решетка антиточек влияет на магнитные свойства ферромагнитных пленок. В частности, решетка немагнитных пор создает поле размагничивания. Это поле влияет на движение стенок магнитных доменов. Стенки магнитных доменов закрепляются на антиточках. Это приводит к повышению коэрцитивной силы [35, 57, 75, 122]. Решетка антиточек влияет на магнитостойкость, магнитную проницаемость и магнитную анизотропию пленки [25, 32, 58, 76, 77, 79, 109, 111]. Наличие пор приводит к замедлению процесса магнитной релаксации [24, 87, 96, 114]. Наличие треугольных антиточек увеличивает время релаксации в 9 раз по сравнению с непрерывной пленкой. Края антиточки связывают магнитный домен и для перемагничивания требуется большее время. Микромагнитное моделирование в комбинации с x-ray микроскопией показало, что для малых размеров антиточек доминирующий вклад дает обменное взаимодействие [82].

В статье [55] проведены экспериментальные исследования спиновой динамики тонкой пленки NiFe с решеткой антиточек на силиконовой подложке. Результаты показывают, что свойства системы зависят от размеров и взаимного расположения пор. В статье [64] экспериментально исследуется процесс перемагничивания пленок Fe, Co и Permalloy (Py) с антиточками, полученными методом наносферной литографии. Увеличение линейных размеров антиточек приводит к расширению петли гистерезиса и линейному росту коэрцитивной силы. В статье [66] методом микромагнитного моделирования исследовано поведение антиточек в пленке кобальта. Исследованы пленки с отверстиями размером 20, 40 и 60 нм. Показано, что регулирование диаметра отверстия позволяет получать коэрцитивную силу заданной величины. При увеличении диаметра отверстия изменяется форма петли гистерезиса и увеличивается коэрцитивная сила.

Зависимость коэрцитивной силы от внешнего магнитного поля близка к линейной. В статье [93] исследованы тонкие пленки Fe, Ni и NiFe с квадратной решеткой антиоточек. На основе широкого набора экспериментальных данных исследована зависимость коэрцитивной силы от параметров решетки и материала пленки. Показано, что коэрцитивная сила растет по нелинейному закону при увеличении линейных размеров квадратных пор. Исследования решетки антиоточек в пленке Co с помощью электронной сканирующей спектроскопии выявили зависимость магнитных свойств от симметрии решеток [7, 33]. Свойства пленки зависят от формы, взаимного расположения и размеров отверстий, а также от расстояния между ними.

Целью данной главы является компьютерное моделирование фазовых переходов в тонких пленках с решеткой антиоточек.

2.2 Зависимость магнитных свойств пленки от размера и формы антиоточек на регулярной решетке

В данной главе рассматриваются структуры, представляющие собой тонкие пленки из ферромагнитных материалов, толщины пленок D варьируются и измеряются в моноатомных слоях (ML). Атомы располагаются в узлах кубической кристаллической решетки, результаты, полученные для такой модели, отображают все характерные явления и особенности поведения систем такого типа. При переходе к другим решеткам результаты могут отличаться, однако все рассматриваемые тенденции и явления сохраняются. Для моделирования рассматривались квадратные пленки с линейными размерами $L \times L$ атомов. На пленках размещалась регулярная квадратная решетка с периодом d атомов, в узлах которой находились квадратные отверстия (антиоточки) со стороной a спинов (Рисунок 2.1).

На первом этапе моделирования рассматривалось поведение системы с фиксированной толщиной пленки $D = 4ML$. В системе линейные размеры антиточек были равны половине от периода решетки $a = d/2$. В таком случае поры всегда составляли четверть от всего объема пленки. Рассматривались периоды решетки от $d = 4$ до $d = 16$ спинов с шагом в 4 спина, линейные размеры всей пленки варьировались от $L = 2d$ до $L = 6d$ с шагом в $\Delta L = d$ для соблюдения циклических граничных условий.

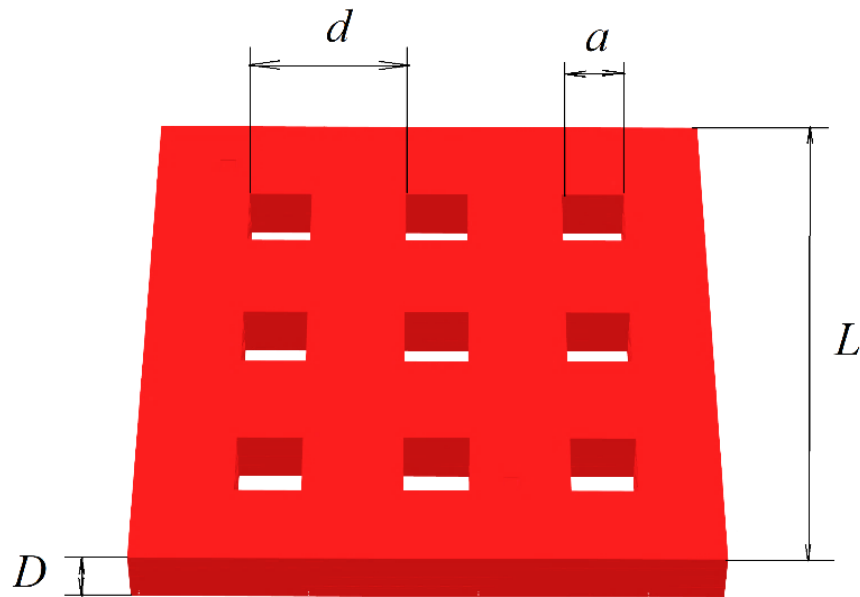


Рисунок 2.1 – Схематическое изображение геометрии моделируемой системы.

Исследовалась зависимость температуры Кюри T_c фазового перехода от периода решетки. Полученные результаты представлены на рисунке 2.2. Наличие решетки антиточек меняет температуру фазового перехода системы в сравнении со сплошной пленкой. Это обосновано уменьшением общего числа спинов в системе и одновременным увеличением площади поверхностного слоя, который проходит по всем внутренним границам антиточек.

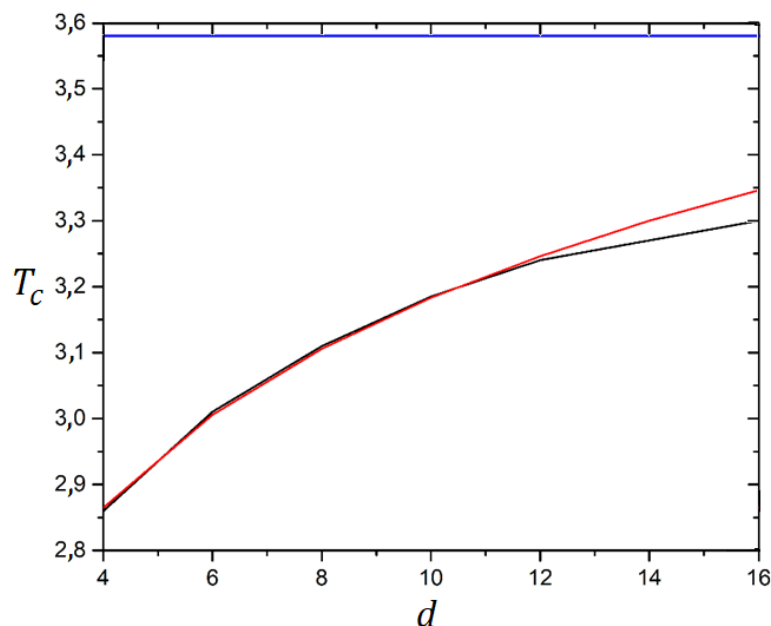


Рисунок 2.2 – Зависимость температуры Кюри от периода решетки антиточек при размере поры $a = d/2$. Черным показан результат компьютерного моделирования, красным изображена аппроксимация логарифмической функцией, синим отмечена температура Кюри для непрерывной пленки.

Как видно из графика, критическая температура нелинейно растет с увеличением периода решетки d и стремится к значению критической температуры, характерной для сплошной тонкой пленки ($T_0 = 3,56$). Зависимость температуры Кюри от периода решетки антиточек при $d < 12$ можно аппроксимировать логарифмической функцией:

$$T_c = 2,384 + 0,347 \cdot \ln d. \quad (2.1)$$

Отклонение от логарифмического характера зависимости происходит при $d \geq 12$, это связано с изменением площади поверхности внутри пор S_{int} , приходящейся на один спин. При данной величине периода решетки величина S_{int} , связанная с размерами пор, начинает вносить меньший вклад в суммарную площадь поверхности, включающую как поверхность внутри пор, так и поверхность на верхней и нижней плоскостях пленки. Величину S_{int} можно вычислить как количество спинов, находящихся на внутренних поверхностях пор:

$$S_{int} = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot 4D \frac{d}{2} = \frac{2L^2 D}{d}. \quad (2.2)$$

Общее количество спинов в пленке вычисляется следующим образом:

$$N = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot \left(Dd^2 - D\frac{d^2}{4}\right) = \frac{3}{4}L^2D. \quad (2.3)$$

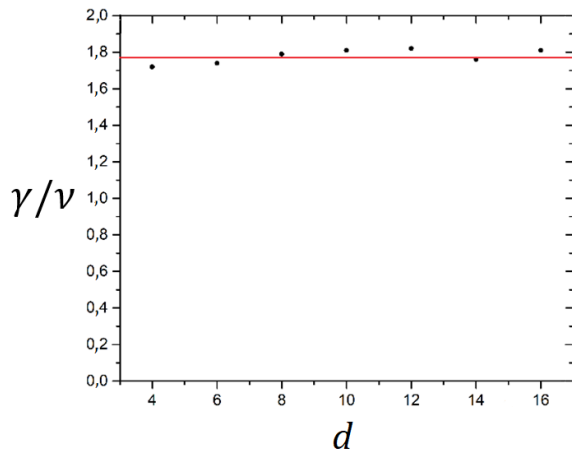
Таким образом можно получить зависимость площади внутренней поверхности на один спин от периода решетки:

$$\frac{S_{int}}{N} = \frac{8}{3d}. \quad (2.4)$$

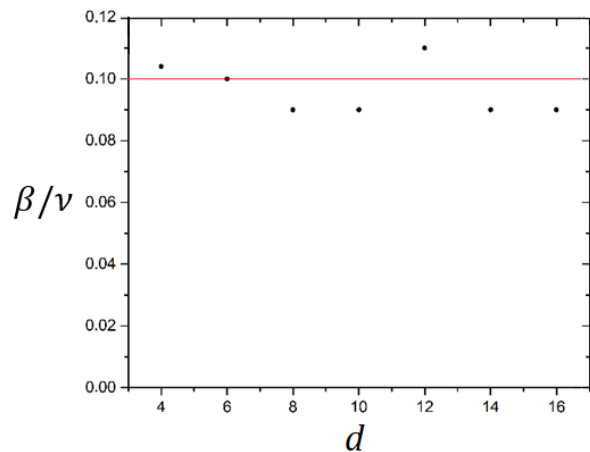
При значениях $d < 12$ данное соотношение принимает значения $S_{int}/N > 0,25$, после которого происходит изменение в характере зависимости, пропадает логарифмическое возрастание: $S_{int}/N (d = 10) \approx 0,27$; $S_{int}/N (d = 12) \approx 0,22$.

Можно сделать вывод, что при увеличении периода решетки температура фазового перехода растет логарифмически до тех пор, пока вклад внутренней поверхности отверстий в суммарную площадь поверхности, приходящейся на один спин системы, превышает порог в 0,25.

Также рассматривается зависимость отношений критических индексов системы γ/ν и β/ν от периода решетки, полученные результаты представлены на рисунке 2.3. Значения этих отношений для сплошной пленки толщиной $D = 4 ML$ соответственно равны $\gamma/\nu = 1,76$ и $\beta/\nu = 0,10$. Полученные в ходе моделирования значения с учетом погрешности: $\gamma/\nu = 1,76 \pm 0,03$ и $\beta/\nu = 0,10 \pm 0,01$. На основе этого можно сделать вывод, что критические индексы не зависят от наличия в пленке решетки антиточек.



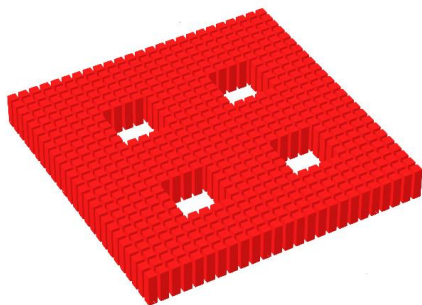
(a)



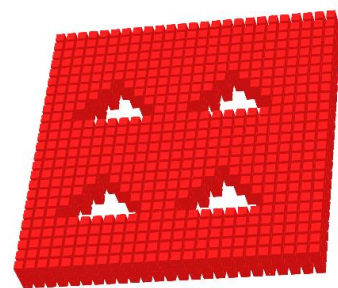
(б)

Рисунок 2.3 – Зависимость отношений критических индексов: а) γ/ν , б) β/ν от периода решетки антиточек d при размере пор $a = d/2$. Красным отмечено значение отношений индексов для непрерывной пленки.

На втором этапе моделирования исследовались решетки с антиточками фиксированного объема, но разной формы отверстий и с разным периодом решетки. Были рассмотрены поры квадратной и треугольной формы (Рисунок 2.4). Сторона отверстий квадратной формы составляла $a = 4$ спинов, длина основания отверстий треугольной формы составляла $a = 7$ спинов, а высота 4 спина. Таким образом, объем отверстий обеих форм с учетом толщины пленки $D = 4$ составлял 64 спина. Площадь внутренней поверхности пор для пленки выбранной толщины, как сумма всех спинов, находящихся на их границе, в обоих случаях равняется 64 спинам.



(a)



(б)

Рисунок 2.4 – Схематическое изображение пленок с различной формой антиточек: а) квадратная, б) треугольная.

Для таких решеток рассматривалась температура фазового перехода при фиксированном размере отверстий, но изменяющимся периодом решетки от $d = 10$ до $d = 16$ спинов с шагом в 2 спина. Результаты представлены на рисунке 2.5. Для системы с треугольными отверстиями температура Кюри ниже, это связано с неравномерностью толщины и наличием более узких участков в «стенках» между отверстиями.

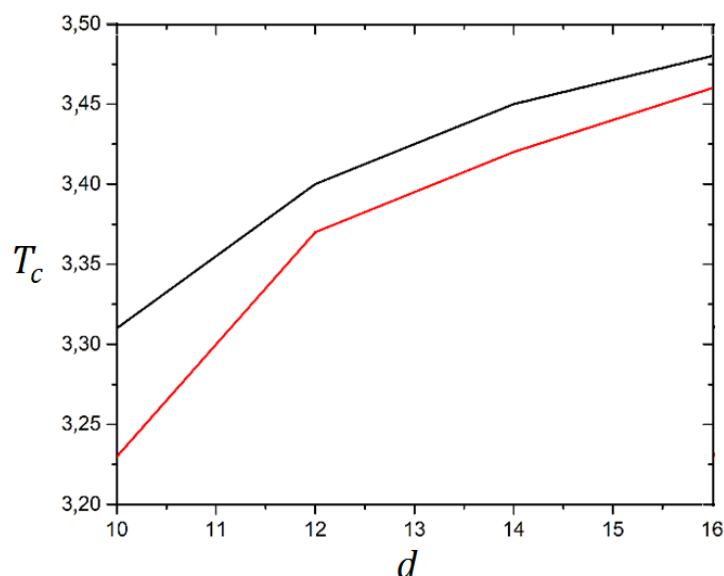


Рисунок 2.5 – Зависимость температуры Кюри T_c от периода решетки антиточек для отверстий постоянного размера. Черная линия соответствует квадратным отверстиям, красная линия соответствует треугольным отверстиям.

Для систем с фиксированными размерами отверстий температура фазового перехода растет быстрее и уже не подчиняется логарифмической зависимости. Это связано с тем, что площадь внутренней поверхности пор, приходящаяся на один спин, убывает быстрее, чем в случае отверстий нефиксированного размера:

$$S_{int} = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot 4Da = \frac{4L^2 Da}{d^2} = \frac{16L^2 D}{d^2};$$

$$N = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot (Dd^2 - Da^2) = \frac{L^2 D(d^2 - a^2)}{d^2} = \frac{L^2 D(d^2 - 16)}{d^2}; \quad (2.5)$$

$$\frac{S_{int}}{N} = \frac{16}{d^2 - 16}.$$

При такой геометрии системы соотношение $S_{int} / N > 0,25$ выполняется для $d = 9$, а значит, в исследуемом интервале внутренняя поверхность отверстий вносит недостаточный вклад для поддержания логарифмического характера роста температуры Кюри.

Значения отношений критических индексов для таких систем также совпадают со значениями, характерными для сплошной пленки.

При исследовании процесса перемангничивания тонких пленок с решеткой антиточек постоянного размера, рассматривались пленки фиксированной толщины $D = 4 ML$. Отверстия квадратной формы со стороной $a = 4$ спина располагались в решетке с периодом от $d = 6$ до $d = 24$ спинов с шагом в 2 спина. Линейный размер системы при моделировании был кратен периоду решетки и составлял $L = 8d$, температура в относительных единицах была выбрана так, чтобы пленка находилась в ферромагнитной фазе при любой решетке антиточек: $T = 2,5$. Магнитное поле изменялось от $h = 1$ до $h = -1$ спинов с шагом в $\Delta h = 0,05$. Характер поведения системы при изменении периода решетки можно наблюдать на рисунке 2.6.

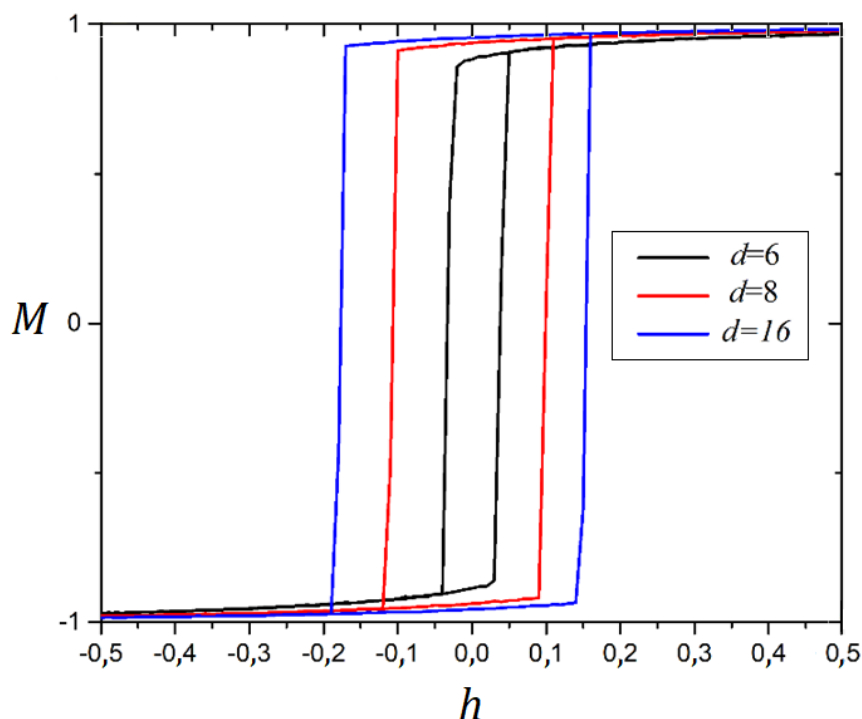


Рисунок 2.6 – Пример петель гистерезиса для $a = 4$ при различных значениях периода решетки антиточек.

Наличие решетки антиточек на пленке не влияет на форму петли гистерезиса, но меняет ее ширину. С увеличением периода решетки растет ширина петли. Это связано с тем, что с увеличением периода уменьшается площадь поверхности, приходящейся на один спин системы. При этом среднее количество соседей у одного спина увеличивается, что усложняет его «переворачивание», а следовательно, увеличивает коэрцитивную силу. Зависимость коэрцитивной силы от периода решетки антиточек продемонстрировано на рисунке 2.7. Коэрцитивная сила нелинейно растет с увеличением периода решетки. С увеличением периода и, соответственно, увеличением числа спинов, ее значение стремится к значению, характерному для сплошной пленки.

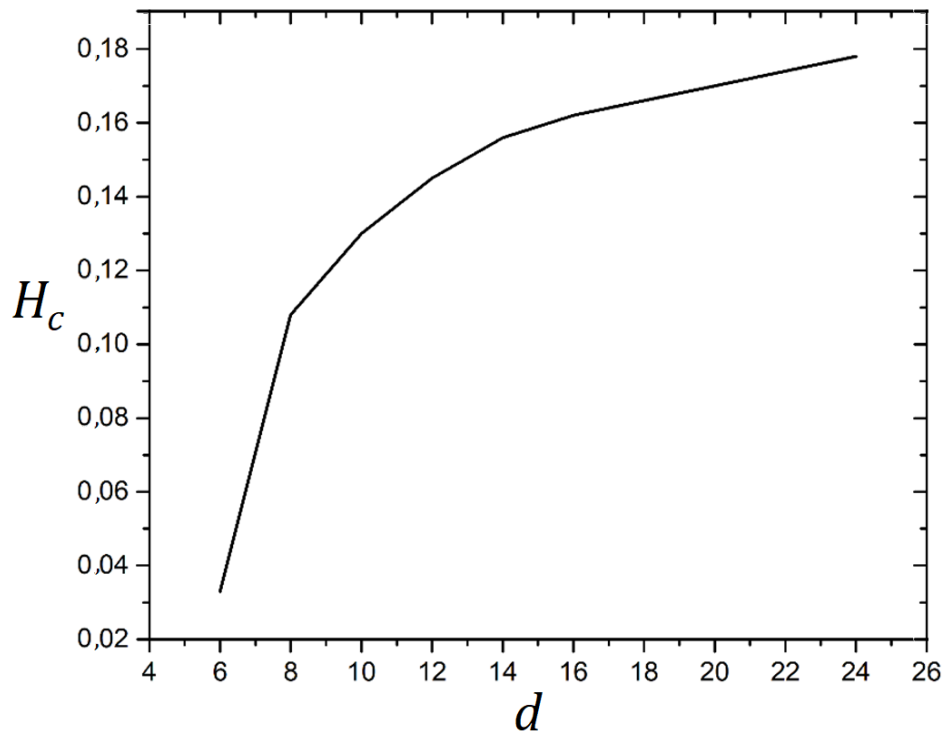


Рисунок 2.7 – Зависимость коэрцитивной силы H_c от периода решетки антиточек для $a =$

4.

2.3 Влияние толщины на процесс перемагничивания пленки с регулярной решеткой

На процесс перемагничивания тонкой пленки с решеткой антиточек может влиять не только размер отверстий, но и толщина самой пленки. При увеличении количества слоев пленки суммарное число спинов в системе растет быстрее, чем количество спинов, находящихся на поверхности.

Для исследования процесса перемагничивания в зависимости от толщины пленки с решеткой антиточек выполнялся компьютерный эксперимент для систем с линейным размером $L = 64$ спина. Толщина пленки изменялась от $D = 2 ML$ до $D = 16 ML$ с шагом $\Delta D = 2 ML$, период решетки антиточек составлял $d = 16$. Для сравнения влияния размеров отверстий рассматривались сплошные пленки и пленки с порами размерами $a = 4$ и $a = 8$ спинов. Для обеспечения ферромагнитной фазы система находилась при температуре $T = 2,5$, магнитное поле изменялось от $h = -0,5$ до $h = 0,5$ с шагом $\Delta h = 0,01$.

На рисунке 2.8 изображены петли гистерезиса для сплошных пленок и пленок с решеткой антиточек различной толщины. С ростом толщины пленки увеличивается количество спинов системы, а значит, увеличивается энергия, необходимая для перемагничивания пленки. В следствие этого увеличивается ширина петли гистерезиса. Данная закономерность наблюдается как для сплошных пленок, так и для пленок с решеткой антиточек. При этом наличие антиточек снижает коэрцитивную силу. Это происходит из-за того, что появление отверстий в пленке уменьшает общее количество спинов в системе, а также увеличивает число спинов, находящихся на границе. У таких спинов меньше энергия обменного взаимодействия с соседями, а значит их переориентация происходит легче.

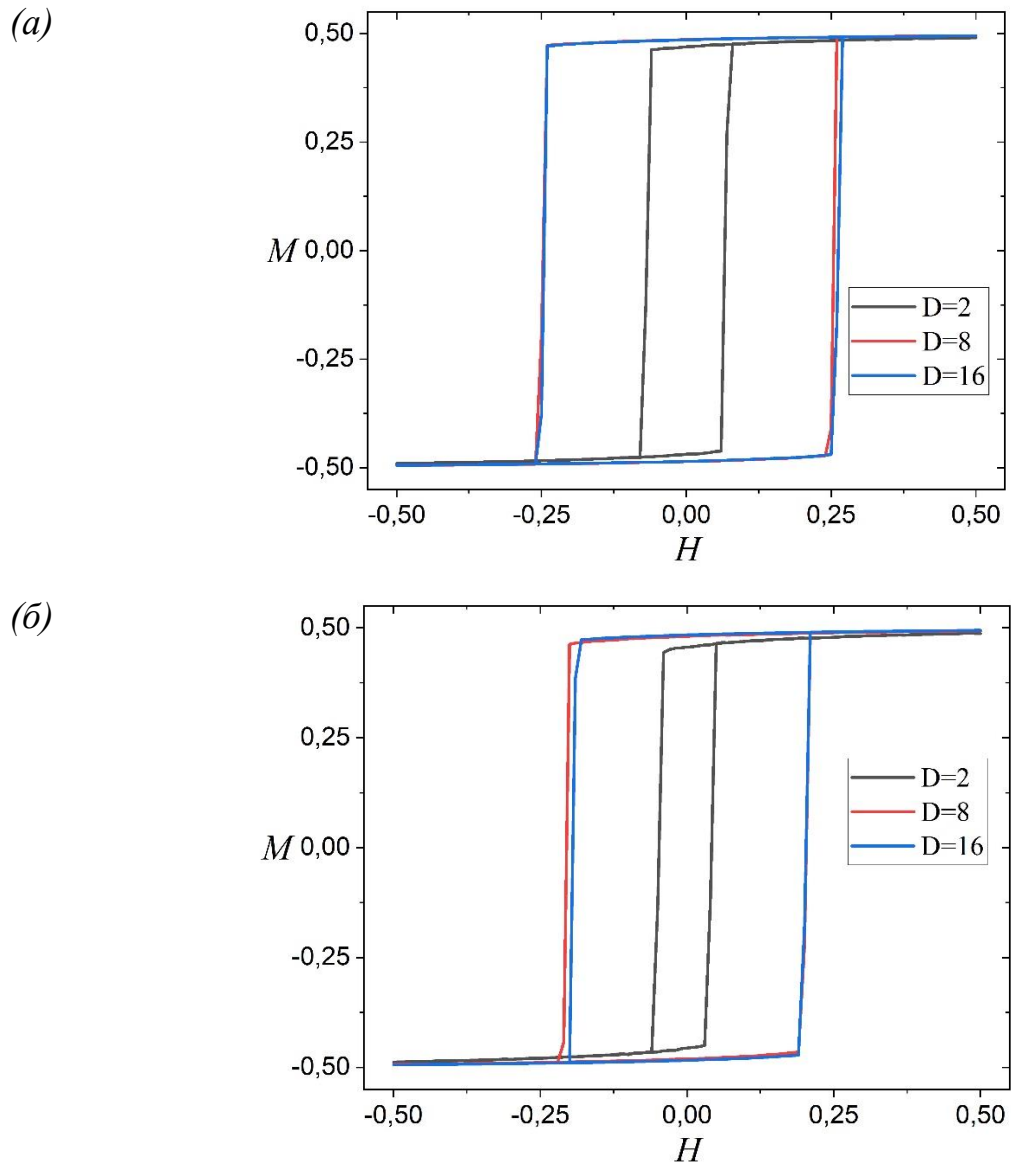


Рисунок 2.8 – Примеры петель гистерезиса при различной толщине пленки D для: а) непрерывной пленки, б) пленки с порами $a = 8$.

Коэрцитивная сила связана с шириной петли гистерезиса, ее значение вычисляется как модуль точки пересечения кривой намагниченности с осью абсцисс. Зависимость коэрцитивной силы H_c от толщины пленки D для сплошной пленки и пленок с массивом пор, имеющих линейные размеры $a = 4$ и $a = 8$ представлена на рисунке 2.9. Коэрцитивная сила нелинейно растет с увеличением толщины пленок для любых рассматриваемых геометрических конфигураций. Начиная с толщины $D = 12 ML$ коэрцитивная сила выходит на насыщение, увеличение размера пор снижает ее максимальное значение.

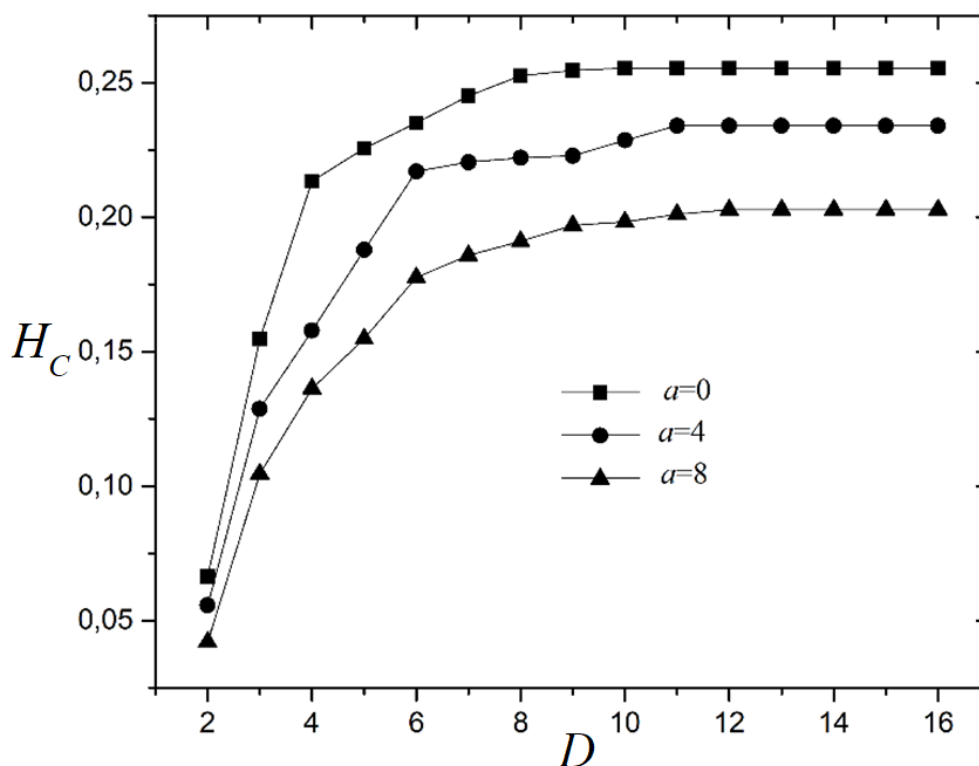


Рисунок 2.9 – Зависимость коэрцитивной силы H_c от толщины пленки D для сплошной пленки ($a = 0$) и пленок с массивом пор, имеющих линейные размеры $a = 4$ и $a = 8$.

2.4 Влияние распределения антиточек в решетке на фазовый переход в пленке

Основная причина изменения магнитных свойств тонкой пленки при нанесении решетки антиточек – изменение площади свободной поверхности. При этом изменяется суммарное количество и энергия парных взаимодействий между спинами. На температуру Кюри и коэрцитивную силу системы влияют размер, форма отверстий, период решетки. При изготовлении тонких ферромагнитных пленок с решетками антиточек, в связи с малостью размеров систем, могут возникнуть погрешности в позиционировании пор внутри ячеек решетки. Пора может занимать не центральное положение в ячейке, а быть смещенной к какой-либо из ее стенок. При этом изменяется толщина перемычек между отверстиями,

что может влиять на энергию взаимодействия спинов и другие исследуемые величины.

Согласно критерию Харриса [44], случайные замороженные точечные дефекты меняют поведение системы при фазовом переходе только если критический индекс $\alpha > 0$. Тонкую пленку можно отнести к двумерным структурам, для которых в модели Изинга $\alpha = 0$, поэтому критерий Харриса к ней не применим. При малой концентрации примесей критическое поведение двумерных систем совпадает с поведением однородных систем [87]. Антиточки имеют размеры, сравнимые с толщиной пленки, поэтому их нельзя отнести к точечным примесям. А значит, такая решетка отверстий может менять поведение системы при фазовом переходе. На данном этапе моделирования определялось влияние распределения отверстий внутри решетки на ферромагнитный фазовый переход.

В данной модели на тонкой пленке толщины D располагается решетка с периодом d спинов. В каждой квадратной ячейке решетки размерами $d \times d$ спинов случайным образом размещается квадратная пора с линейным размером a спинов. Такая конфигурация соответствует регулярной решетке антиточек со случайными отклонениями в позиционировании отверстий. Пример такого расположения пор приведен на рисунке 2.10.

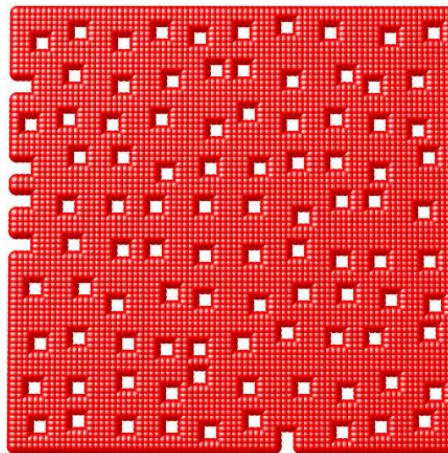


Рисунок 2.10 – Пример пленки со случайным расположением отверстий для периода решетки $d = 8$ и размера отверстий $a = 4$.

В работе рассматривались пленки толщиной в $D = 4 ML$. Размеры системы изменялись от $L = 32$ до $L = 80$ спинов с шагом в $\Delta L = 16$ спинов. Период решетки был фиксированным и равнялся $d = 8$ спинов. Размеры антиточек изменялись от $a = 0$ до $a = 6$, и случай $a = 0$ соответствует сплошной пленке. Для получения более точных значений для каждой комбинации геометрических параметров пленки производилось вычисление по $N = 20$ случайным конфигурациям расположения антиточек в решетке. Температура фазового перехода и значения отношений критических индексов усреднялись по всем конфигурациям, увеличение числа конфигураций $N > 20$ незначительно влияло на изменение результатов.

График зависимости усредненной по конфигурациям температуры фазового перехода T_c от размера пор a показан на рисунке 2.11. Из графика видно, что температура нелинейно убывает с ростом размера пор. Температура фазового перехода зависит от средней энергии взаимодействия всех спинов в системе. Поэтому, при увеличении размеров отверстия, уменьшается энергия взаимодействия спинов в системе и падает температура Кюри.

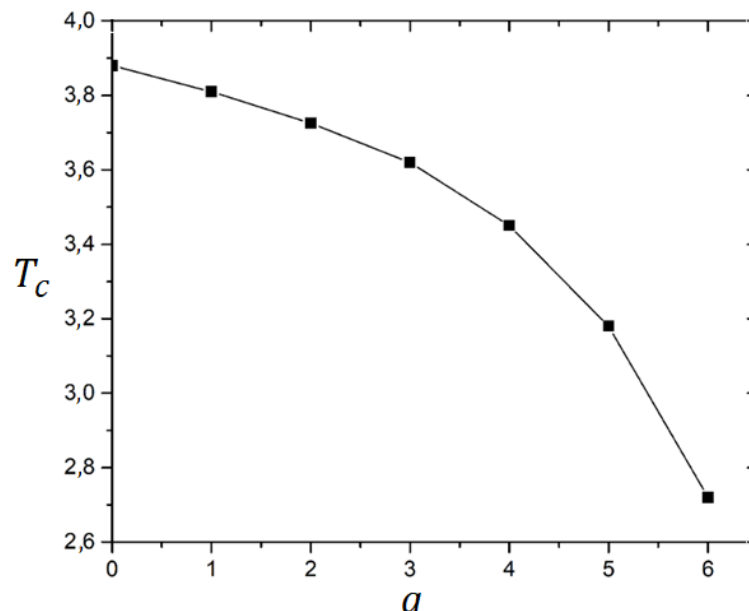


Рисунок 2.11 – График зависимости температуры фазового перехода T_c от размера антиточек.

Площадь внутренней поверхности, приходящейся на один спин в такой системе:

$$S_{int} = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot 4Da = \frac{4L^2 Da}{d^2} = \frac{4L^2 Da}{64};$$

$$N = \left(\frac{L}{d}\right)^2 \cdot (Dd^2 - Da^2) = \frac{L^2 D(d^2 - a^2)}{d^2} = \frac{L^2 D(64 - a^2)}{64}; \quad (2.6)$$

$$\frac{S_{int}}{N} = \frac{4a}{64 - a^2}.$$

При такой конфигурации на температуру фазового перехода влияют не только площади поверхностей пор, но и расположение самих отверстий, толщина стенок между ними.

График зависимости температуры фазового перехода T_c от логарифма количества спинов на верхних и нижних поверхностях пленки $\ln(d^2 - a^2)$ показан на рисунке 2.12. Наблюдается логарифмический рост температуры Кюри от количества спинов на поверхности пленки:

$$T_c = (-1.72 \pm 0.04) - (1.33 \pm 0.02) \ln(d^2 - a^2). \quad (2.7)$$

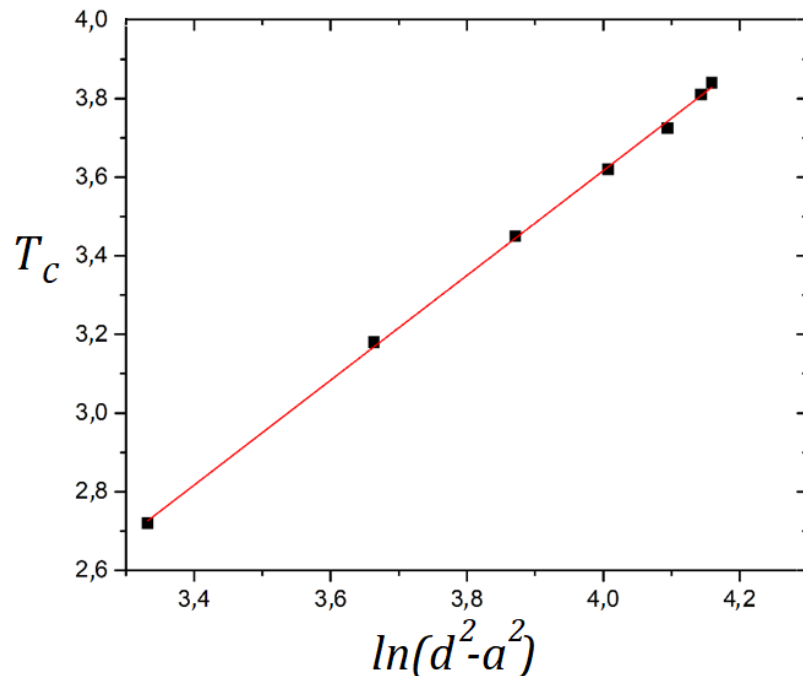


Рисунок 2.12 – График зависимости температуры фазового перехода T_c от логарифма площади поверхности пленки.

Для описания поведения системы при фазовом переходе помимо температуры перехода важную роль играет определение характера изменения

термодинамических параметров. Изменение магнитной восприимчивости и теплоемкости характеризуются соотношениями критических индексов. Далее рассматривались отношения критических индексов γ/ν и β/ν для такой конфигурации системы. Результаты расчета данных соотношений для различного значения размера отверстий показаны в таблице 2. Таблица также содержит размерность системы, вычисленную из скейлингового соотношения:

$$D = \gamma/\nu + 2\beta/\nu. \quad (2.8)$$

Как видно из таблицы 2, значения отношений критических индексов с учетом погрешности совпадают с аналогичными значениями для двумерной модели Изинга при размерах пор, не превышающих $a \leq 3$. Критическое поведение системы начинает отличаться от сплошной двумерной пленки при $a \geq 4$. В этом случае объем пор приближается к объему вещества в системе. В таком случае система перестает быть пленкой с набором дефектов, а по своей геометрии приближается к сетке из неравномерных по толщине нанопроволок. Пример такой структуры приведен на рисунке 2.13.

Таблица 2 – Отношение критических индексов при различных значениях размера поры.

a	γ/ν	β/ν	D
0	$1,75 \pm 0,01$	$0,13 \pm 0,01$	2,02
1	$1,76 \pm 0,02$	$0,12 \pm 0,01$	1,99
2	$1,73 \pm 0,02$	$0,13 \pm 0,01$	2,00
3	$1,74 \pm 0,02$	$0,12 \pm 0,01$	2,02
4	$1,81 \pm 0,03$	$0,10 \pm 0,02$	2,01
5	$1,82 \pm 0,02$	$0,10 \pm 0,01$	2,03
6	$1,83 \pm 0,02$	$0,10 \pm 0,02$	2,02

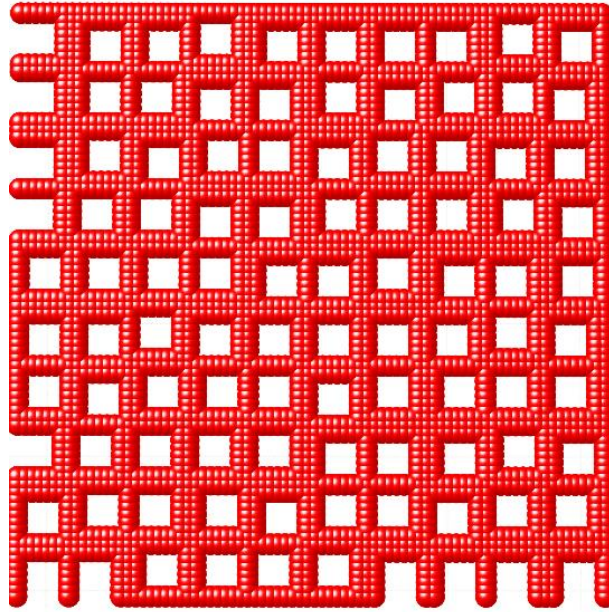


Рисунок 2.13 – Пример пленки со случайно расположенными большими порами для периода решетки $d = 8$ и размера отверстий $a = 6$.

В данной главе проведено исследование тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиточек методом компьютерного моделирования. Результаты показывают согласие с данными экспериментов. Магнитные свойства системы зависят от формы и размеров отверстий. Период решетки оказывает сильное влияние на температуру Кюри. Основным фактором, влияющим на магнитные свойства пленки с решеткой антиточек, является площадь свободной поверхности. Форма отверстий изменяет температуру Кюри системы. Если размеры отверстий увеличиваются пропорционально периоду решетки антиточек, то температура фазового перехода растет по логарифмическому закону. Если размеры отверстий остаются постоянными, то рост температуры фазового перехода более быстрый. Во всех случаях температура Кюри стремится к значению для непрерывной пленки.

Изменение температуры Кюри в пленках с решеткой антиточек по сравнению с непрерывными пленками зафиксировано экспериментально [9]. Компьютерное моделирование в рамках двумерной модели Гейзенберга с большой анизотропией [1] показало, что температура Кюри убывает с ростом размера пор по нелинейному закону для пленки с регулярной решеткой антиточек. Авторы статьи показали, что скорость убывания температуры Кюри достаточно большая, но не определили

явный закон зависимости температуры фазового перехода от линейных параметров решетки антиточек.

Расчеты критических экспонент в компьютерном моделировании показали ступенчатый закон их изменения. Если площадь пор меньше 50% площади пленки, то критические экспоненты совпадают с критическими экспонентами однородной тонкой пленки. Если площадь пор не менее 50% площади пленки, то меняется характер критического поведения всей структуры. Это свидетельствует о качественном изменении магнитного поведения системы. Эта смена магнитных свойств была экспериментально обнаружена по другим параметрам.

Зависимость магнитного поведения пленки с решетками антиточек от размера пор была экспериментально исследована с помощью процесса перемангничивания [9, 20]. Эти исследования выявили скачкообразное изменение формы петли гистерезиса, начинающееся с некоторого размера пор. Авторы объясняют этот эффект ограничениями на рост магнитных доменов. Пленки с решеткой больших пор демонстрируют поведение аналогичное массиву из наночастиц. Однако это исследование проводилось для отверстий круглой формы. Для случая, рассматриваемого в статье, происходит переход к массиву нанопроволок. Аналогичное изменение магнитных свойств наблюдалось экспериментально и для пор квадратной и треугольной формы [20]. Скачкообразное изменение свойств пленок с решеткой антиточек при увеличении размеров пор зафиксировано также с помощью спектров спиновых волн [24, 82]. Для решетки с большим диаметром антиточек наблюдается широкая полоса мод, которая систематически уменьшается с уменьшением диаметра пор.

Ширина петли гистерезиса зависит от периода решетки антиточек. Коэрцитивная сила растет по нелинейному закону. Этот результат находится в хорошем согласии с экспериментальными данными [47, 70, 116, 118] и результатами микромагнитного моделирования [40].

2.5 Выводы

По результатам, изложенным в данной главе, можно сделать следующие выводы:

1. Решетка антиточек оказывает влияние на температуру фазового перехода в тонких ферромагнитных пленках:

1.1. Температура фазового перехода нелинейно растет с увеличением периода решетки антиточек и стремится к значению, характерному для сплошной тонкой пленки. Основное влияние на температуру Кюри оказывает площадь свободной поверхности. Для значения периодов, при которых вклад внутренней поверхности отверстий в суммарную площадь поверхности на один спин системы не превышает порог в 0.25, зависимость температуры Кюри может быть аппроксимирована логарифмической функцией.

1.2. Случайные смещения положения пор от узлов решетки не влияют на температуру фазового перехода. Температура фазового перехода слабо зависит от формы пор.

1.3. Зависимость критических индексов от размера пор носит ступенчатый характер. При малом размере пор критические индексы совпадают со значениями, характерными для непрерывных пленок. Если размеры пор становятся больше расстояния между порами, то реализуется новый класс универсальности критического поведения.

2. Решетка антиточек оказывает влияние на процесс перамагничивания тонких ферромагнитных пленок:

2.1. Ширина петли гистерезиса растет с увеличением периода решетки антиточек. Зависимость коэрцитивной силы от периода имеет нелинейный характер.

2.2. Коэрцитивная сила нелинейно растет с увеличением толщины пленки с решеткой антиточек. Начиная с толщины $D = 12 ML$ коэрцитивная сила выходит в насыщение, при этом увеличение размера пор снижает ее максимальное значение.

Глава 3. Магнитные свойства бислойной тонкой пленки с решеткой антиточек

3.1 Описание модели бислойной пленки с решеткой антиточек

Отдельный класс магнитных структур составляют бислойные тонкие пленки. При нагревании или при попадании во внешнее магнитное поле слои такой пленки ведут себя по-разному, так как изготовлены из материалов с различными магнитными свойствами [5]. При этом слои влияют на поведение друг друга посредством взаимодействия атомов на границе соприкосновения. Соприкасающиеся поверхности двух разных слоев принято называть интерфейсом.

Мерой для описания поведения вещества в магнитном поле могут служить коэрцитивная сила и магнитная восприимчивость. Для намагничивания или перемагничивания магнитомягкого материала необходимы небольшие внешние магнитные поля, магнитная проницаемость таких веществ велика. Они обладают низкой коэрцитивной силой (не более 4 кА/м) и, соответственно, узкой петлей гистерезиса. К веществам этой группы можно отнести пермаллой, пермендюр, некоторые ферриты, феррогранаты.

Магнитотвердые вещества характеризуются более низкими значениями магнитной проницаемости. Для достижения состояния магнитного насыщения или перемагничивания вещества необходимы большие внешние поля, а коэрцитивная сила принимает значения $H_c > 4$ кА/м. В качестве магнитотвердых материалов могут использоваться следующие сплавы: магнико, ални, викаллой, и другие.

При компьютерном моделировании бислойных тонких структур поведение вещества и характер взаимодействия спинов в нем описывается обменными интегралами J . Данная величина в модели Изинга описывает зависимость энергии системы от значения спинов в ней, чем больше обменный интеграл, тем больше энергия взаимодействия между двумя соседними спинами. Поэтому в отношении

материалов с разной магнитной восприимчивостью верно следующее соотношение между обменными интегралами магнитотвердого и магнитомягкого веществ:
 $J_{hard} > J_{soft}$.

Графическое изображение используемой в работе модели представлено на рисунке 3.1.

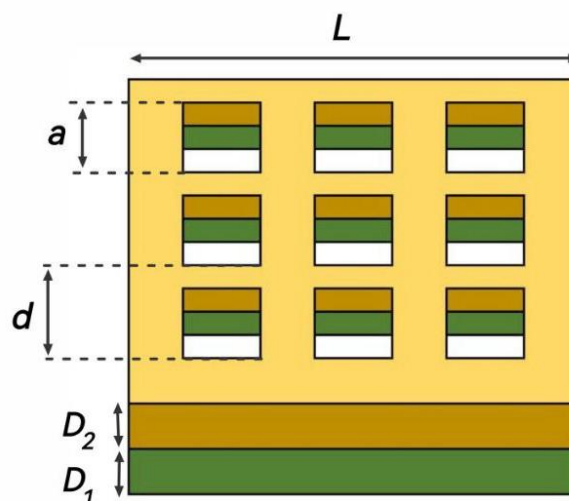


Рисунок 3.1 – Схематическое изображение модели бислойной пленки. Зеленым цветом обозначен магнитотвердый слой, желтым цветом обозначен магнитомягкий слой.

Модель представляет собой тонкую пленку из двух слоев, расположенную на плоскости OXY . Нижний слой выполнен из магнитотвердого материала, характеризующимся обменным интегралом J_1 , имеет толщину D_1 , и ограничена плоскостями $z = 0$ и $z = D_1 - 1$. Верхний слой выполнен из магнитомягкого материала, характеризующимся обменным интегралом $J_2 < J_1$, имеет толщину D_2 , и ограничена плоскостями $z = D_1$ и $z = D_1 + D_2 - 1$. Спины расположены в кубической кристаллической решетке, другие виды решеток в работе не рассматривались. Моделирование кубической решетки позволяет выявить основные явления и закономерности поведения систем, сохраняющиеся для других решеток. Линейные размеры квадратной пленки обозначались L , на пленке располагается решетка квадратных антиточек с линейным размером отверстия a и периодом решетки d . Гамильтониан бислойной структуры в модели Изинга можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
H_0 = & -J_1 \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ 0 \leq z_1, z_2 < D_1}} S_i(z_1)S_j(z_2) - J_2 \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ D_1 \leq z_1, z_2 < D_1 + D_2}} S_i(z_1)S_j(z_2) - \\
& -\sqrt{J_1 J_2} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ z_1 = D_1 - 1, z_2 = D_1}} S_i(z_1)S_j(z_2) + \mu_B h_0 \sum_i S_i(z_1) \quad (3.1)
\end{aligned}$$

Здесь запись вида $S_i(z_1), S_j(z_2)$ обозначает величины спинов i, j , которые принадлежат системе и являются ближайшими соседями. Они находятся на слоях с аппликатами z_1, z_2 соответственно. Первое слагаемое отражает взаимодействие соседних спинов в слоях магнитотвердой пленки. Второе слагаемое описывает взаимодействие соседних спинов, если каждый из них принадлежит магнитомягкой пленки. Третье слагаемое определяет взаимодействие спинов на интерфейсе, когда один из соседей является атомом магнитотвердого вещества, а другой магнитомягкого. Для обменных интегралов в этом случае использовано правило объединения Лоренца-Бертло [112]. Четвертое слагаемое описывает взаимодействие системы со внешним магнитным полем.

При моделировании удобно оперировать относительными единицами. Поэтому для упрощения анализа влияния значения обменных интегралов вводится их отношение: $R = J_2/J_1 < 1$. В таком случае гамильтониан можно записать в единицах обменного интеграла J_1 : $H = H_0/J_1$, в таком случае также нормируется величина внешнего поля: $h = h_0/J_1$.

$$\begin{aligned}
H = \frac{H_0}{J_1} = & - \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ 0 \leq z_1, z_2 < D_1}} S_i(z_1)S_j(z_2) - R \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ D_1 \leq z_1, z_2 < D_1 + D_2}} S_i(z_1)S_j(z_2) \\
& -\sqrt{R} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ z_1 = D_1 - 1, z_2 = D_1}} S_i(z_1)S_j(z_2) + \mu_B h \sum_i S_i(z_1) \quad (3.2)
\end{aligned}$$

Для анализа процессов, происходящих в бислойной пленке, и оценки влияния слоев друг на друга все термодинамические параметры и важные величины, как кумулянты Биндера, вычислялись отдельно для магнитотвердого, магнитомягкого

слоев, и для всей пленки в целом. Примером могут служить подсчитываемые величины намагниченности:

$$m_1 = \left(\sum_{0 \leq z < D_1} S_i(z) \right) / (L^2 D_1); \quad m_2 = \left(\sum_{D_1 \leq z < D_1 + D_2} S_i(z) \right) / (L^2 D_2); \quad (3.3)$$

$$m = \left(\sum_{0 \leq z < D_1 + D_2 - 1} S_i(z) \right) / (L^2 (D_1 + D_2)).$$

В данной работе рассматриваются тонкие бислойные пленки с решеткой антиточек, в которых фиксированы толщина магнитотвердого слоя $D_1 = 8 ML$ и размер отверстий в пленке $a = 2$ спина. Целью данной главы ставилось определить зависимость магнитных свойств пленки от периода решетки антиточек d , толщины магнитомягкого слоя D_2 и соотношения обменных интегралов R .

3.2 Зависимость температуры фазового перехода от геометрических параметров пленки

На данном этапе моделирования рассматривались бислойные пленки с толщиной магнитомягкого слоя от $D_2 = 2 ML$ до $D_2 = 8 ML$ с шагом $\Delta D_2 = 2 ML$. Размеры системы изменялись от $L = 32$ до $L = 96$ с шагом $\Delta L = 16$. Отношение обменных интегралов варьировалось от $R = 0,4$ до $R = 0,8$ с шагом $\Delta R = 0,1$. Период решетки антиточек принимал значения: $d = 4, d = 8, d = 16$.

Для каждой конфигурации выполнялось вычисление температур фазовых переходов в каждом из слоев и во всей пленке совокупно. По результатам расчетов кумулянт Биндера (графики представлены на рисунке 3.2) было выявлено, что температура фазового перехода в бислойной пленке не зависит от толщины магнитомягкого слоя и совпадает с температурой Кюри магнитотвердого слоя. Эта закономерность наблюдается как для сплошной пленки, так и для пленок с решетками антиточек. Как и в случае монослойной пленки, температура Кюри

нелинейно растет с увеличением периода решетки антиточек и стремится к значению, характерному для сплошной пленки.

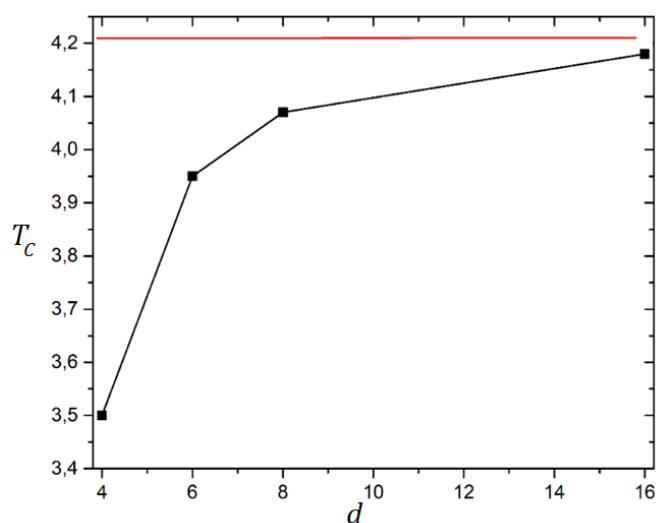


Рисунок 3.2 – График зависимости температуры фазового перехода T_c бислойной пленки от периода решетки антиточек. Сплошной линией показана температура непрерывной пленки без решетки антиточек.

3.3 Влияние геометрических параметров пленки на процесс перемагничивания

Для моделирования процесса перемагничивания пленки расчеты выполнялись при температуре $T = 2,5$, это обеспечивает нахождение в ферромагнитной фазе обоих слоев пленки. Магнитное поле изменялось от $h = 0,5$ до $h = -0,5$ спинов с шагом в $\Delta h = 0,05$. В начале исследовалось поведение в магнитном поле сплошной бислойной пленки. Пример полученных графиков зависимости намагниченности системы от внешнего поля при различных толщинах магнитомягкого слоя приведены на рисунке 3.3. Отношение обменных интегралов варьировалось от $R = 0,4$ до $R = 0,8$ с шагом $\Delta R = 0,1$.

Наличие магнитомягкого слоя может вносить существенные изменения в процесс перемагничивания всей пленки. При малом отличии обменных интегралов слоев пленки ($R > 0,5$) наличие магнитомягкого слоя не влияет на процесс

перемагничивания. При этом происходит снижение коэрцитивной силы с увеличением толщины магнитомягкого слоя. Это связано с тем, что упорядочение спинов в магнитомягком слое происходит при более низких внешних магнитных полях. Далее магнитомягкий слой влияет на магнитотвердый слой через интерфейс.

При большом отличии обменных интегралов разных слоев пленки ($R \leq 0,5$) наблюдается искажение формы петли гистерезиса. В начале процесса перемагничивания большее влияние оказывается на магнитомягкий слой пленки. Когда этот слой выходит в состояние насыщения, намагниченность системы начинает возрастать за счет влияния взаимодействия спинов вблизи интерфейса на магнитотвердый слой. Затем образуется горизонтальный участок «ступеньки» внутри петли гистерезиса до того момента, как внешнее поле примет величину, достаточную для перемагничивания магнитотвердого слоя. Также наблюдается более заметное снижение коэрцитивной силы с увеличением толщины магнитомягкого слоя.

Бислойная пленка с решеткой антиточек ведет себя аналогично сплошной пленке. На рисунке 3.4 представлены петли гистерезиса для пленки с решеткой антиточек при различной толщине магнитомягкого слоя и различных отношениях обменных интегралов.

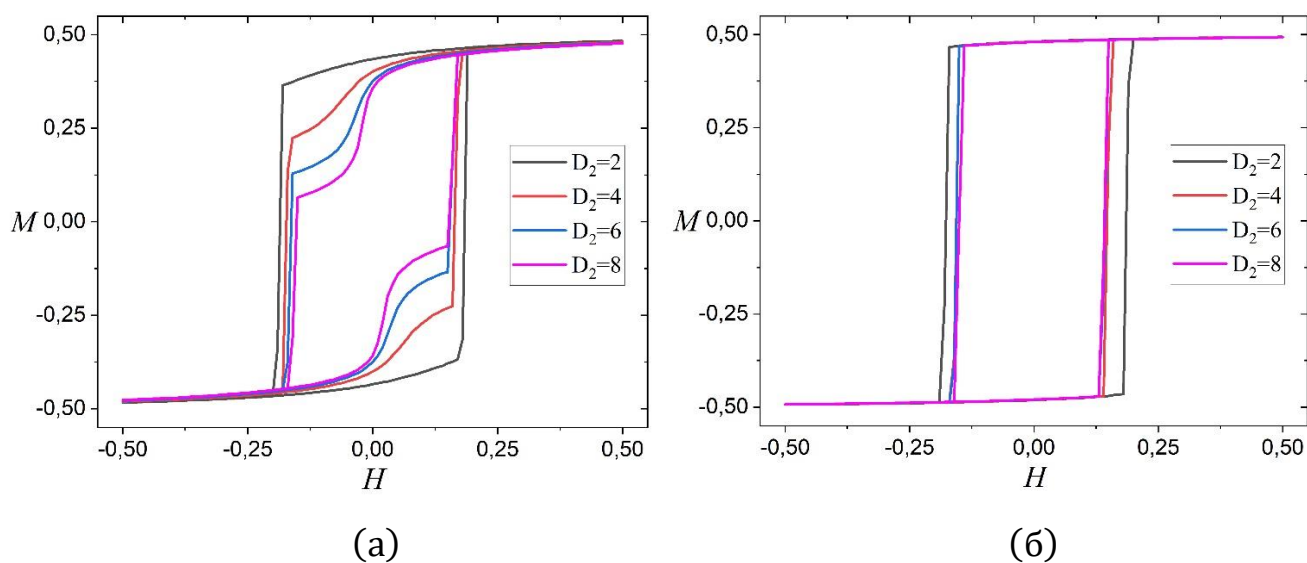


Рисунок 3.3 – Петли гистерезиса для пленок с различной толщиной магнитомягкого слоя D_2 и отношением обменных интегралов R : а) $R = 0,4$, б) $R = 0,8$.

Как видно из рисунка 3.4, при увеличении периода решетки антиточек поры начинают занимать малую часть от всего объема пленки и свойства систем стремятся к свойствам к непрерывной пленке. Если же период решетки антиточек уменьшается ($d = 4$), то увеличивается число пор на единицу площади, что приводит к сужению петли гистерезиса. Искажение формы петли гистерезиса также становится меньше (рис. 3.4 а).

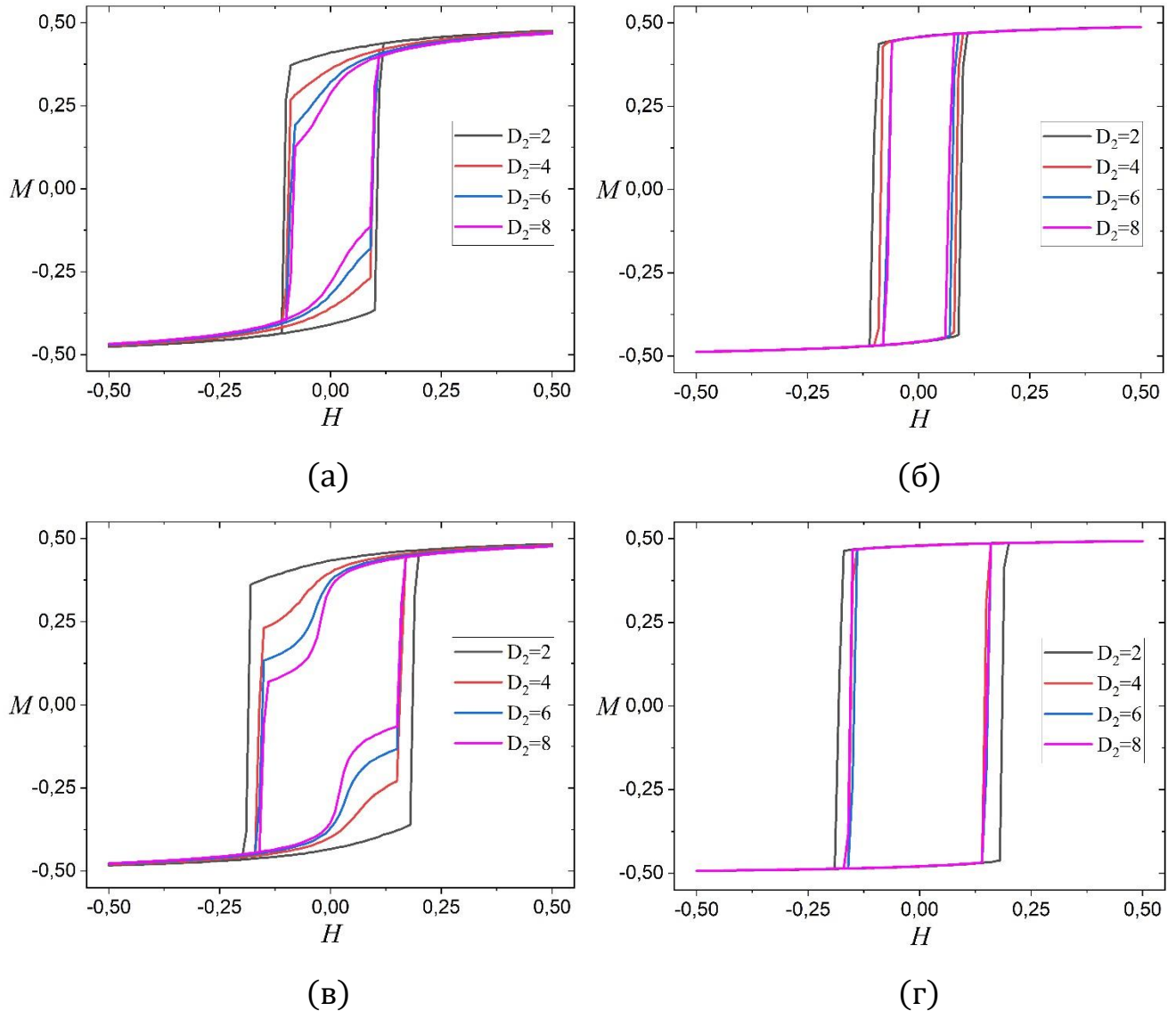


Рисунок 3.4 – Петли гистерезиса для пленок с различной толщиной магнитомягкого слоя D_2 , отношением обменных интегралов R и периодом решетки антиточек d : а) $R = 0,4, a = 2, d = 4$, б) $R = 0,8, a = 2, d = 4$, в) $R = 0,4, a = 2, d = 16$, г) $R = 0,8, a = 2, d = 16$.

На рисунке 3.5 представлена зависимость коэрцитивной силы H_c от отношения обменных интегралов R при различной толщине магнитомягкой

составляющей D_2 для сплошной пленки и пленки с разными периодами решетки антиточек d .

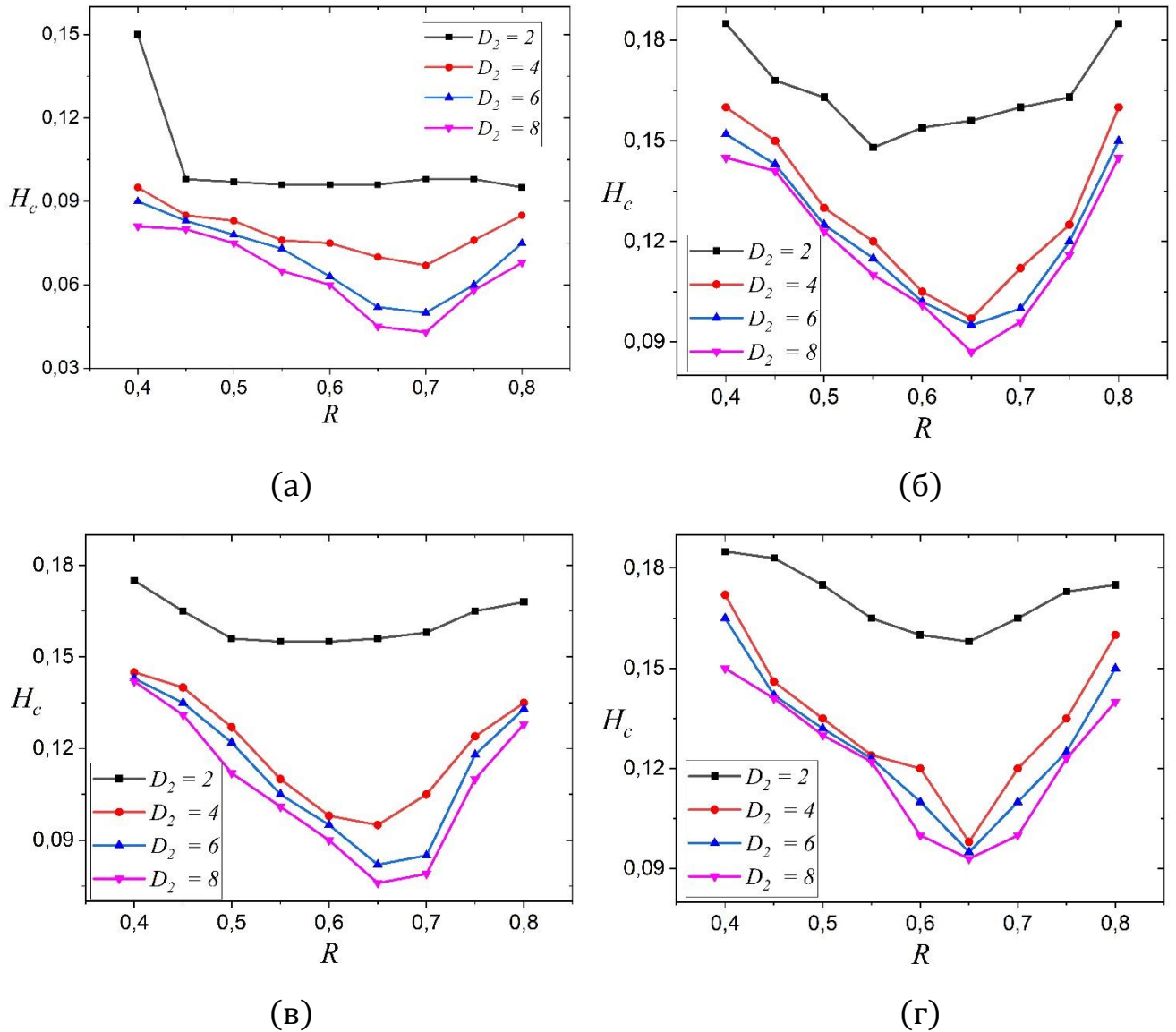


Рисунок 3.5 – Зависимость коэрцитивной силы H_c от отношения обменных интегралов R при различной толщине магнитомягкой составляющей D_2 для сплошной пленки и пленки с разными периодами решетки антиточек d . а) сплошная пленка, б) $d = 16$, в) $d = 8$, г) $d = 4$.

На графиках зависимости коэрцитивной силы от отношения обменных интегралов присутствует ярко-выраженный минимум. При увеличении отношения обменных интегралов уменьшается различие между магнитным поведением слоев пленки. Поле, необходимое для перемагничивания магнитомягкой пленки растет, а значит уменьшается ее влияние на магнитотвердую пленку, что приводит к

увеличению коэрцитивной силы. При сильном уменьшении значения отношения обменных интегралов уменьшается поле, необходимое для перемагничивания магнитомягкого слоя. При этом происходит последовательное перемагничивание сначала магнитомягкой, а затем магнитотвердой пленки, при котором возникает «ступенька» в петле гистерезиса (рис. 3.4). При этом влияние на интерфейсе становится недостаточным для уменьшения коэрцитивной силы. Совокупность описанных явлений объясняет наличие минимума рассматриваемой зависимости.

Минимальная коэрцитивная сила наблюдается при отношении обменных интегралов в интервале $0,6 \leq R \leq 0,7$. Данный минимум присутствует для пленок с любым периодом решетки антиоточек и любой толщиной магнитомягкого слоя. Однако минимум менее ярко выражен для сплошной бислоистой пленки.

Далее проводится сравнение коэрцитивной силы для пленок с различным периодом решетки антиоточек и одинаковой толщиной магнитомягкого слоя ($D_2 = 6 ML$). Результаты зависимости коэрцитивной силы от отношения обменных интегралов для пленок с различным периодом решетки антиоточек и одинаковым магнитомягким слоем представлены на рисунке 3.6.

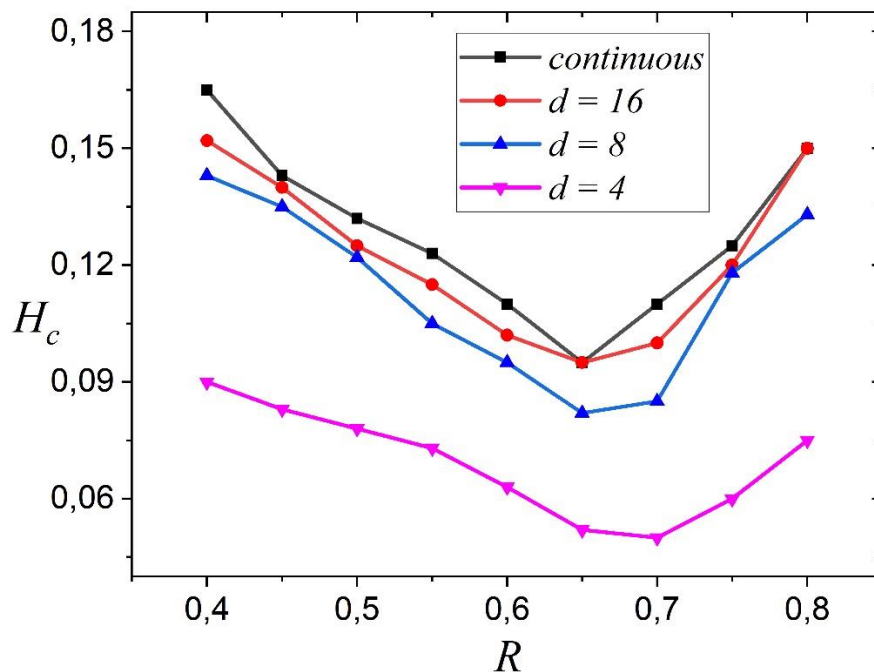


Рисунок 3.6 – Графики зависимости коэрцитивной силы H_c от отношения обменных интегралов R для пленок с толщиной магнитомягкого слоя $D_2 = 6 ML$ и различным периодом решетки антиоточек.

При уменьшении периода решетки антиточек снижается коэрцитивная сила, при этом общий характер зависимости остается неизменным. Это снижение можно объяснить уменьшением общего количества спинов в системе.

Энергия перемагничивания пленки пропорциональна площади петли гистерезиса. Для петель гистерезиса правильной формы без искажений данная величина пропорциональна величине коэрцитивной силы. Однако с добавлением магнитомягкого слоя и решетки антиточек, форма петли искажается. При чем искажения увеличиваются неравномерно с изменением периода решетки и толщины магнитомягкого слоя. Это объясняет необходимость отдельного исследования поведения энергии перемагничивания при изменении геометрических параметров пленки. На рисунке 3.7 представлены графики зависимости энергии перемагничивания двуслойной пленки от отношения обменных интегралов при различных значениях толщины магнитомягкого слоя и разных значениях периода решетки антиточек. Как видно из рисунка 3.7, на графиках зависимости энергии перемагничивания от отношения обменных интегралов также присутствует минимум в интервале $0,6 \leq R \leq 0,7$. Несмотря на связь с графиком намагниченности, профиль графиков зависимости энергии перемагничивания отличается от графиков коэрцитивной силы. В области малых значений R для энергии перемагничивания наблюдается менее резкое убывание, ее значение в этой области ниже, чем в области малого отличия обменных интегралов. Для величины коэрцитивной силы такой зависимости не наблюдается. Это связано с наличием «ступенек» в петлях гистерезиса при большом отличии обменных интегралов, так как данные особенности уменьшают площадь петли.

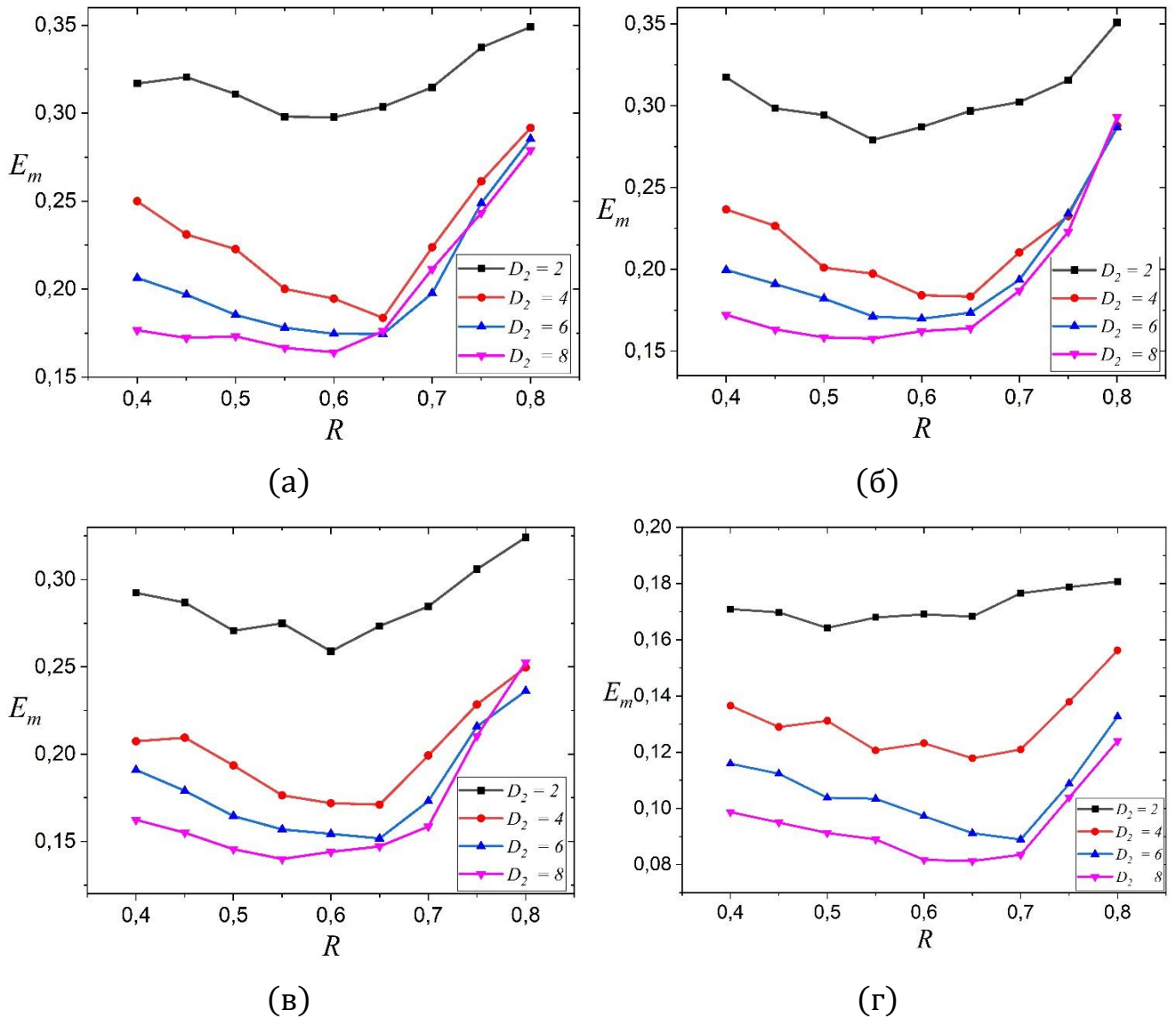


Рисунок 3.7 – Зависимость энергии перемагничивания E_m от отношения обменных интегралов R при различной толщине магнитомягкой составляющей D_2 для сплошной пленки и пленки с разными периодами решетки антиточек d : а) сплошная пленка, б) $d = 16$, в) $d = 8$, г) $d = 4$.

Наблюдается снижение энергии перемагничивания при увеличении толщины магнитомягкого слоя. Проведем сравнение одинаковых по толщине пленок ($D_2 = 6 ML$) с различным периодом решетки антиточек. На рисунке 3.8 приведена зависимость энергии перемагничивания от отношения обменных интегралов.

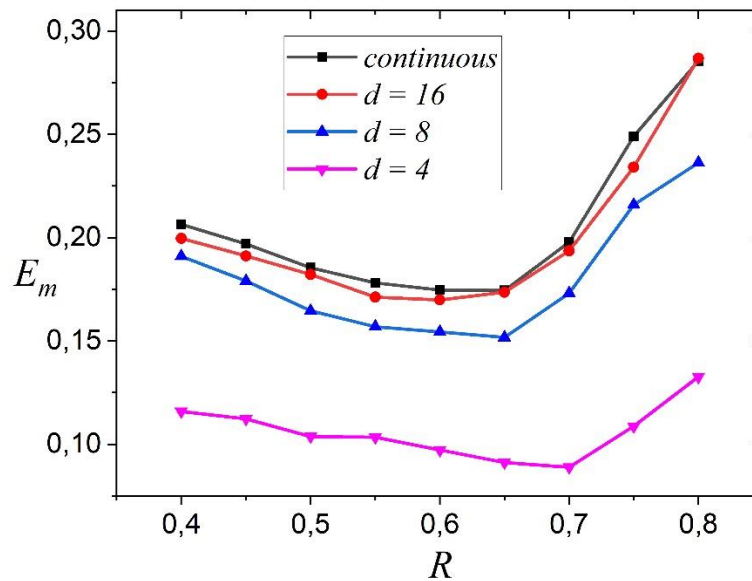


Рисунок 3.8 – График зависимости энергии перемагничивания от отношения обменных интегралов при $D_2 = 6 ML$ и различном периоде решетки антиоточек.

Из графика на рисунке 3.8 видно, что уменьшение периода антиоточек, то есть увеличение плотности пор, существенно снижает энергию, необходимую для перемагничивания всей пленки. Это связано с общим уменьшением количества спинов в системе и одновременном увеличении площади поверхностного слоя, перемагничивание в котором происходит легче.

3.4. Сравнение с экспериментом

Проведем сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. В статье [7] исследованы двухслойные пленки $Pu(10 \text{ нм})/TbCo(30 \text{ нм})$. Кристаллические решетки данных пленок отличны от кубической при комнатной температуре, поэтому можно использовать усредненное значение $a_0 = 0,3 \text{ нм}$, что приводит к толщине магнитотвердого слоя $D_1 = 100 ML$ и толщине магнитомягкого слоя $D_2 = 33 ML$. Отношение обменных интегралов может быть получено на основе сравнения критических температур Co и Pu . $R = T_c(Pu)/T_c(TbCo) = 0,49$. Экспериментальное исследование перемагничивания в

работе [7] выполнялось при комнатной температуре. Учитывая, что $k_B T_C = 4,51 J_1$, комнатная температура 300 К соответствует относительной температуре $T = 2,23$. В реальном эксперименте период решетки пор составлял $d = 105 \text{ нм} = 350 ML$, размер пор $a = 75 \text{ нм} = 250 ML$. Петля гистерезиса, полученная при расчетах для этих параметров приведена на рисунке 3.9.

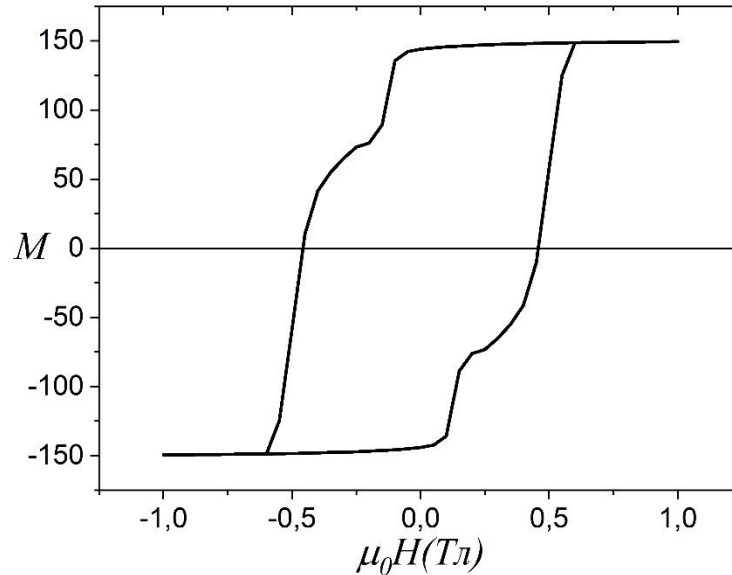


Рисунок 3.9 – Расчетная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Ru/TbCo.

Экспериментальная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Ru/TbCo из статьи [7] представлена на рисунке 3.10.

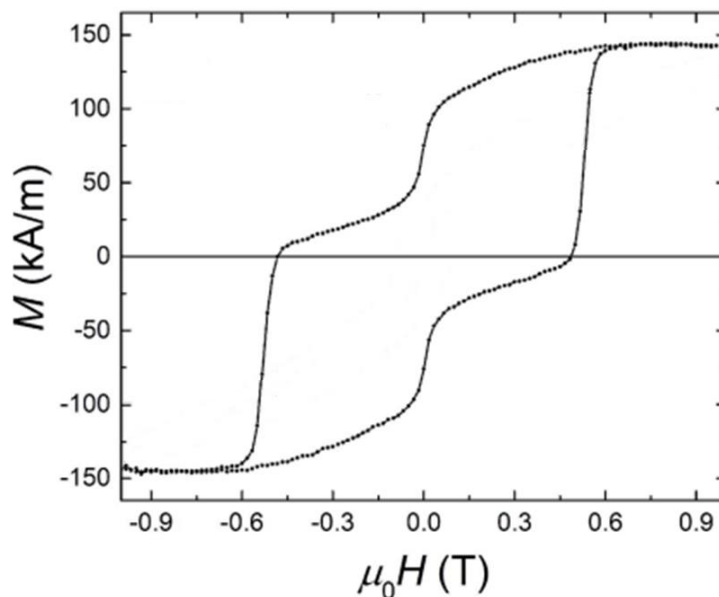


Рисунок 3.10 – Экспериментальная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Ru/TbCo [7].

Сравнение расчетной и экспериментальной петлей гистерезиса показывает, что качественно их вид совпадает. На экспериментальной кривой сильнее выражено отклонение формы петли гистерезиса от прямоугольной формы, а также более низкое расположение «изгиба». Эти отклонения могут быть связаны с тем, что при расчетах использовалась простая кубическая решетка, что не соответствует реальным материалам. Различие в кристаллических решетках сказывается на определении относительной толщины пленки в моноатомных слоях, которое и определяет положение изгиба петли. Расчетное значение коэрцитивной силы $\mu_0 H_C^{\text{теор}} = 0,60$ Тл близко к экспериментальному значению $\mu_0 H_C^{\text{эксп}} = 0,58$ Тл [7].

Также результаты компьютерного моделирования сравнивались с экспериментальными данными для бислоистой пленки Co(20 нм)/Pу(27 нм) [8]. Принимая период решетки равным приблизительно $a_0 = 0,3$ нм, получаем толщину слоев $D_1 = 57 ML$ и $D_2 = 77 ML$. Параметры решетки пор: период $d = 240$ нм = $686 ML$, размер пор $a = 40$ нм = $114 ML$. Отношение обменных интегралов $R = T_C(Py)/T_C(Co) = 0,55$. Относительная температура $T = 0,97$. Петля гистерезиса, полученная при расчетах для этих параметров приведена на рисунке 3.11.

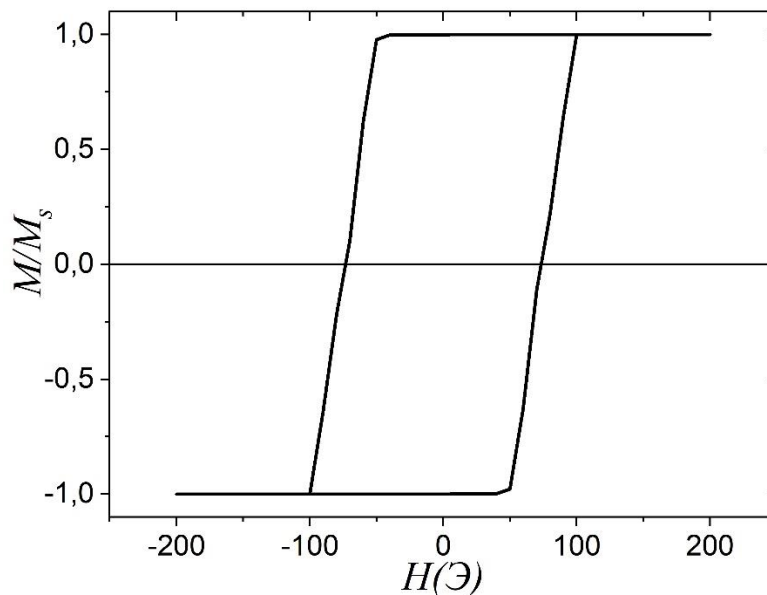


Рисунок 3.11 – Расчетная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Pу/TCo.

Экспериментальная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Ru/Co из статьи [8] представлена на рисунке 3.12.

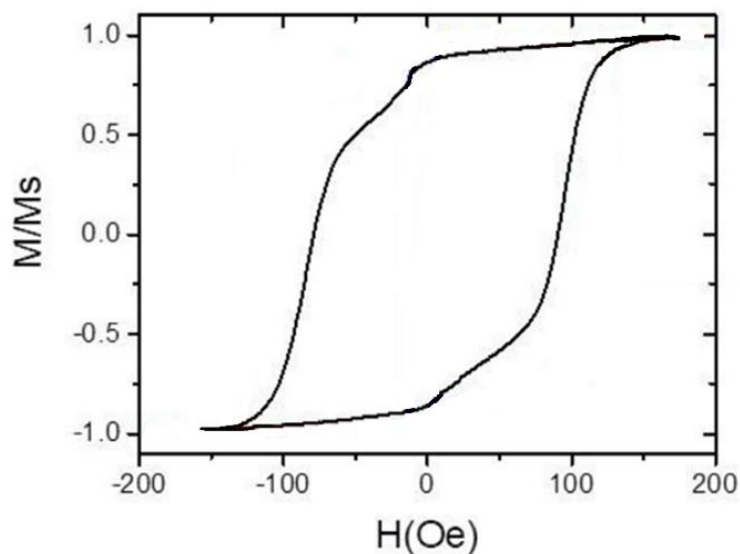


Рисунок 3.12 – Экспериментальная петля гистерезиса для наноструктурированной пленки Ru/Co [8].

Сравнение расчетной и экспериментальной петель гистерезиса показывает, что в компьютерном моделировании получается кривая близкая по форме к опытным данным. Расчетное значение коэрцитивной силы $H_C^{\text{теор}} = 75$ Э близко к экспериментальному значению $H_C^{\text{эксп}} = 79$ Э [8].

3.5 Выводы

По результатам данной главы можно сделать следующие выводы:

1. Температура фазового перехода в бислойной пленке не зависит от толщины магнитомягкого слоя и совпадает с температурой Кюри магнитотвердого слоя. Для пленки с решеткой антиточек критическая температура с увеличением периода решетки растет нелинейно и стремится к значению, характерному для непрерывной пленки.

2. Магнитомягкая составляющая пленки искажает петлю гистерезиса только при значительном отличии их обменных интегралов $R < 0,5$ как для сплошной, так и для пористой пленки. Увеличение числа пор уменьшает это искажение.

3. Зависимость коэрцитивная силы бислойных пленок от отношения обменных интегралов составляющих ее слоев имеет четко выраженный минимум. Минимальная коэрцитивная сила наблюдается при отношении обменных интегралов в интервале $0,6 \leq R \leq 0,7$. Минимум присутствует для пленок с любым периодом решетки антиточек и любой толщиной магнитомягкого слоя. Увеличение количества антиточек на единицу площади снижает коэрцитивную силу.

4. На графике зависимости энергии перемагничивания бислойных пленок от отношения обменных интегралов слоев наблюдается четко выраженный минимум. Минимальная энергия перемагничивания наблюдается при отношении обменных интегралов в интервале $0,6 \leq R \leq 0,7$. Энергия перемагничивания уменьшается при увеличении толщины магнитомягкого слоя. Увеличение количества антиточек на единицу площади существенно снижает энергию перемагничивания.

Глава 4. Влияние поверхностного магнетизма на тонкие ферромагнитные пленки с решеткой антиточек

4.1. Введение

Для некоторых ферромагнитных материалов наблюдается явление поверхностного магнетизма, связанное с отличием температуры упорядочивания спинов в поверхностном слое от температуры Кюри в основном объеме системы [22, 86]. Причина возникновения поверхностного магнетизма состоит в отличии обменного интеграла взаимодействия между поверхностными спинами от аналогичного значения для двух спинов в объеме системы [54, 80].

Добавление решетки антиточек существенно увеличивает свободную поверхность пленки, а также приводит к взаимодействию и взаимному влиянию двух граничных плоскостей. Как было показано ранее [12] для сплошных тонких пленок увеличение обменного интеграла на поверхности может существенно влиять на температуру Кюри и коэрцитивную силу системы. При увеличении толщины пленки возможен поверхностный фазовый переход, температура которого выше, чем у объемного фазового перехода. Чем тоньше пленка, тем сильнее влияние поверхностного обменного интеграла на магнитные свойства пленки. Эта закономерность объясняется увеличением относительного количества поверхностных спинов в системе. Существует пороговое значение толщины пленки, начиная с которого происходит разделение объемного и поверхностного фазовых переходов.

В связи с увеличением площади поверхности в пленках с антиточками растет относительная доля спинов, взаимодействие которых определяется поверхностным обменным интегралом. Вследствие этого влияние поверхностного магнетизма в таких пленках должно проявляться сильнее, чем в непрерывных системах.

Особый интерес для приложений спинтроники представляют ферромагнитные пленки с сильной перпендикулярной магнитной анизотропией. Такие пленки позволяют существенно улучшить магнитные логические микросхемы, спинтронные устройства и устройств памяти с произвольным доступом [30, 84, 119]. Наибольших успехов удается добиться для многослойных пленок Co/Permalloy [72, 96]. Данные пленки обладают сильной перпендикулярной анизотропией. Изменение толщины пленки, диаметра и плотности пор позволяет управлять их намагниченностью и коэрцитивной силой [38, 74, 91, 102].

Целью данной главы ставится исследование методом Монте-Карло влияния поверхностного магнетизма на магнитные свойства тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиточек.

4.2. Описание модели пленки с поверхностными эффектами

При компьютерном моделировании рассматривалась тонкая ферромагнитная пленка с порами квадратной формы. Толщина пленки равна D моноатомных слоев (ML). Поры в пленке имеют размер $a \times a$ атомов. Поры располагаются в узлах квадратной сетки с периодом d . Геометрия системы представлена на рисунке 4.1.

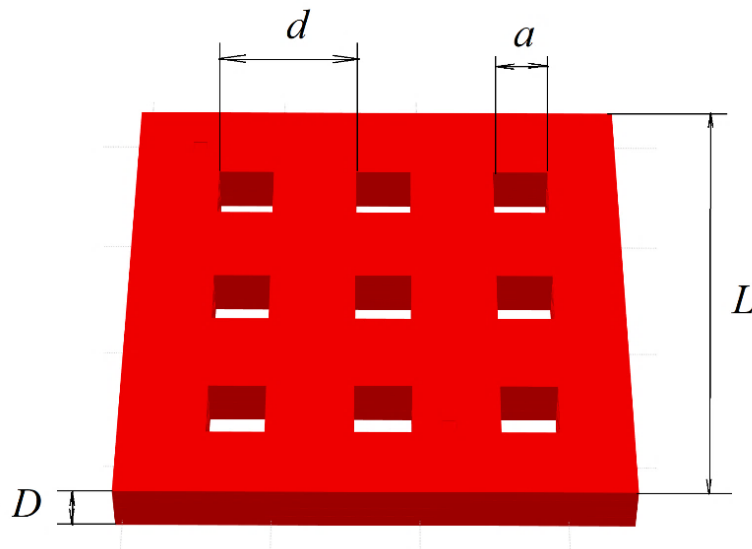


Рисунок 4.1 – Схематическое изображение геометрии моделируемой системы.

Для описания магнитных свойств использовалась модель Изинга. Данная модель применима для описания тонких ферромагнитных систем с легкой осью намагничивания. В рассматриваемых пленках с решеткой антиточек экспериментально наблюдается [72, 94, 121] магнитная анизотропия вдоль оси перпендикулярной плоскости пленки. В модели Изинга каждый атом с номером (i, j) характеризуется проекцией спина S_{ij} на ось легкой намагниченности. Проекция спина может принимать одно из двух значений ($1/2$ или $-1/2$). Для такой системы гамильтониан вычисляется как сумма парных обменных взаимодействий для ближайших соседей.

$$H_0 = -J \sum_{Bulk} S_{ij} S_{kl} - J_S \sum_{Surface} S_{ij} S_{kl} - J_{BS} \sum_{\frac{B}{S}} S_{ij} S_{kl} - \mu_B h_0 \sum S_{ij}. \quad (4.1)$$

Гамильтониан разбит на четыре суммы. В первом слагаемом суммируются энергии обменного взаимодействия пар спинов, находящихся в объеме системы. Это взаимодействие описывается обменным интегралом J . Во втором слагаемом рассматриваются только пары спинов, находящиеся на поверхности. Обменный интеграл такого взаимодействия равен J_S . Третье слагаемое рассматривает пары спинов, один из которых расположен на свободной поверхности пленки, а второй в первом подповерхностном слое. Обменный интеграл для такой пары спинов равен J_{BS} . Отличие обменных интегралов на поверхности и в объеме системы связано с небольшими искажениями кристаллической решетки в поверхностном слое. Данные искажения изменяют расстояния между атомами, что приводит к изменениям значений обменных интегралов [39, 52]. Отличие обменных интегралов приводит к явлению поверхностного магнетизма, состоящего в том, что магнитный момент на поверхности может отличаться от объемного значения при одинаковой температуре. При этом отличие между поверхностным и объемным магнитным моментом убывает вглубь пленки по экспоненциальному закону. В связи с этим при моделировании достаточно учитывать отличие обменных интегралов в поверхностном слое и первом подповерхностном слое. В дальнейшем использовалось правило согласования, для которого $J_{BS} = \sqrt{J \cdot J_S}$ [112]. Четвертое

слагаемое показывает взаимодействие с внешним магнитным полем h_0 . μ_B – магнетон Бора. Поры моделируются с помощью атомов с нулевым спином.

При компьютерном моделировании более удобной является форма гамильтониана в относительных единицах.

$$H = \frac{H_0}{J} = - \sum_{Bulk} S_{ij}S_{kl} - R \sum_{Surface} S_{ij}S_{kl} - \sqrt{R} \sum_{\frac{B}{S}} S_{ij}S_{kl} - h \sum S_{ij}. \quad (4.2)$$

Здесь введены обозначения: $R = J_S/J$, $h = \mu_B h_0/J$. Температура системы T также рассчитывается в относительных единицах $T = k_B t/J$, где k_B – постоянная Больцмана, а t – термодинамическая температура.

Для исследования поверхностного и объемного фазового переходов вычислялось значение поверхностной намагниченности m_S и объемной намагниченности m , как средние значения спинов соответствующей подсистемы.

$$m = \left(\sum_{i,j=1}^L S_{ij} \right) / N, \quad m_S = \left(\sum_{i,j=1}^L S_{ij} \right) / N_S. \quad (4.3)$$

L – это линейный размер системы вдоль одного направления. N – количество ненулевых спинов в объеме системы, N_S – количество ненулевых спинов на поверхности пленки с учетом поверхности внутри пор. Значения намагниченностей m и m_S играют роль параметров порядка для объемного и поверхностного фазовых переходов соответственно. При этом следует учитывать, что в пленке с порами к поверхностным относятся также спины внутри поверхностей пор. То есть у пленки с порами, в отличие от сплошной пленки, есть только одна свободная поверхность.

В компьютерном эксперименте моделировались пленки с линейными размерами $L \times L \times D$. Пленка располагалась параллельно плоскости OXY . Сверху и снизу пленка ограничивается плоскостями $z = 0$ и $z = D - 1$. Вдоль осей OX и OY накладывались периодические граничные условия. Для формирования спиновых конфигураций использовался алгоритм Метрополиса и теории конечномерного скейлинга [18]. Для изучаемой системы определялась температура фазового

перехода для основного объема системы T_C и точка Кюри для поверхности системы T_S . Температуры фазовых переходов независимо определялись по трем параметрам. Первым параметром были кумулянты Биндера четвертого порядка для обеих подсистем.

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad U_S = 1 - \frac{\langle m_S^4 \rangle}{3\langle m_S^2 \rangle^2}. \quad (4.4)$$

Угловыми скобками обозначено усреднение по конфигурациям спинов. Различные спиновые конфигурации формировались с помощью алгоритма Метрополиса [56]. Температура фазового перехода определяется как точка пересечения кумулянтов Биндера для систем с различным линейным размером L .

Второй подход был основан на вычислении магнитных восприимчивостей основного объема и свободной поверхности системы.

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)/T, \quad \chi_S = \left. \frac{\partial m_S}{\partial h} \right|_{h=0} = N(\langle m_S^2 \rangle - \langle m_S \rangle^2)/T. \quad (4.5)$$

В точке фазового перехода второго рода магнитная восприимчивость имеет резкий максимум. В третьем подходе вычислялись энергетические кумулянты четвертого порядка.

$$V = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle^2}, \quad V_S = 1 - \frac{\langle E_S^4 \rangle}{3\langle E_S^2 \rangle^2}. \quad (4.6)$$

В этих формулах E – это энергия взаимодействия спинов внутри системы без учета поверхностного слоя. Эта величина вычислялась с помощью первого и третьего слагаемого формулы (4.2). E_S – это энергия взаимодействия спинов на поверхности пленки, вычисляемая с помощью второго и третьего слагаемого формулы (4.2). Угловые скобки также означают усреднение по спиновым конфигурациям. В точке фазового перехода зависимость энергетических кумулянтов от температуры имеет резкий минимум. Четвертый метод основан на вычислении составляющей теплоемкости системы, обусловленной обменным взаимодействием спинов.

$$C = N(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/T, \quad E_S = N(\langle E_S^2 \rangle - \langle E_S \rangle^2)/T. \quad (4.7)$$

В точке фазового перехода теплоемкость демонстрирует резкий максимум.

Необходимость определения точки Кюри по четырем параметрам обусловлена нестабильностью поведения системы при наличии поверхностного фазового перехода. При обычном фазовом переходе все четыре параметра согласованно демонстрируют одинаковую температуру фазового перехода. Следует отметить, что магнитная восприимчивость показывает немного заниженное значение критической температуры. Однако это различие имеет одинаковое значение для всех геометрических размеров системы и отношения обменных интегралов и может быть введено в виде поправочного аддитивного параметра. Метод, основанный на кумулянтах Биндера, считается наиболее точным для определения температуры Кюри [18]. Однако при появлении на фазовой диаграмме поверхностного и экстраординарного фазовых переходов кумулянты Биндера начинают демонстрировать нестабильное поведение. При малых различиях в температурах объемного и поверхностного фазовых переходов кумулянты Биндера показывают одну усредненную температуру, тогда как на графиках магнитной восприимчивостей, теплоемкостей и энергетических кумулянтов присутствуют два четко различимых экстремума. Для поверхностного фазового перехода точка пересечения кумулянтов Биндера может располагаться в области близкой к максимальному их значению $2/3$ или нулевому значению, что не позволяет определить температуру фазового перехода. Для экстраординарного фазового перехода кумулянты Биндера демонстрируют немонотонное поведение, что приводит к множеству различных точек пересечения, что не позволяет локализовать температуру Кюри. Вычисление трех дополнительных параметров системы позволяет достаточно точно локализовать температуру фазового перехода в случае, если максимумы на их графике являются недостаточно острыми. Острота пика на графиках магнитной восприимчивости и теплоемкости повышается при увеличении размеров системы. Для энергетических кумулянтов, наоборот, при увеличении размеров системы происходит сглаживание минимумов.

Процесс перемагничивания исследовался только в ферромагнитной фазе, так как устройства спинтроники используют пленки в этой фазе. Температура системы

выбиралась так, чтобы система находилась ниже линии обычного и экстраординарного фазовых переходов. Исследовалось перемагничивание системы во внешнем магнитном поле при помощи алгоритма Метрополиса. Первоначально система помещается в сильное магнитное поле h_0 , которое ориентирует все спины в одном направлении. После этого поле уменьшается с шагом Δh до значения $-h_m$. Затем поле вновь увеличивается с шагом Δh до значения h_m . Система приводится в состояние равновесия при каждом значении внешнего поля и вычисляется ее намагниченность m . График зависимости намагниченности m от магнитного поля h демонстрирует петлю гистерезиса. По пересечению петли гистерезиса с осью абсцисс может быть определена коэрцитивная сила H_C . Площадь петли гистерезиса определяет энергию перемагничивания пленки E_m в относительных единицах.

4.3. Результаты компьютерного моделирования

4.3.1. Температура фазового перехода

Компьютерный эксперимент выполнялся для пленок толщиной от $D = 4 ML$ до $D = 16 ML$ с шагом $\Delta D = 2 ML$. При необходимости проводились расчеты некоторых свойств пленок другой толщины. Период решетки антиточек оставался постоянным $d = 8$. Линейные размеры пор, образующих решетку антиточек, изменялись от $a = 2$ до $a = 6$ с периодом $\Delta a = 1$. Расчеты для пор размером $a = 1$ не дают дополнительной значимой информации. Линейные размеры системы изменялись от $L = 24$ до $L = 48$ с шагом $\Delta L = 8$. Количество шагов Монте-Карло на спин равно $8 \cdot 10^5$. Отношение обменных интегралов изменялось от $R = 1,0$ до $R = 2,5$ с шагом $R = 0,1$. Системы с отношением обменных интегралов $R > 2,5$ не имеют физического смысла, так как эти значения не соответствуют реальным материалам. Расчеты показали различие в поведении систем с толщиной $D \leq 6 ML$

и $D \geq 7 ML$. Причем это различие обусловлено свойствами непрерывных пленок. Для пленок с толщиной $D \leq 6 ML$ поверхностный фазовый переход не происходит ни при каких значениях R . Для пленок с толщину $D \geq 7 ML$ существует значение R_{sp} , начиная с которого упорядочивание спинов на поверхности и в основном объеме системы происходит при разных температурах.

4.3.1.1. Пленки толщиной $D \leq 6 ML$

Для сплошных пленок толщиной не более $6 ML$ не наблюдается поверхностный фазовый переход. Вся система переходит из парамагнитного в ферромагнитное состояние при одной и той же температуре при всех отношениях обменных интегралов. На рисунке 4.2 (а, б, в) приведены графики зависимости объемных и поверхностных магнитных восприимчивостей, энергетических кумулянтов и теплоемкостей от температуры для сплошной пленки толщиной $D = 4$ при $R = 1,0$. Аналогичные графики для $R = 2,0$ приведены на рисунке 4.2 (г, д, е).

Как видно из рисунка 4.2, температура пиков термодинамических функций, вычисляемых отдельно для поверхностных и объемных спинов, совпадает, что позволяет делать вывод о совпадении температур фазового перехода в объеме и на поверхности системы. При расчетах температура изменялась с шагом $\Delta T = 0,1$, что накладывает ограничения на определение точки Кюри. Значения критической температуры может быть уточнено с помощью кумулянтов Биндера четвертого порядка. Пример зависимости объемных и поверхностных кумулянтов от температуры для пленки толщиной $D = 4$ при $R = 2,0$ и систем различного размера представлен на рисунке 4.3.

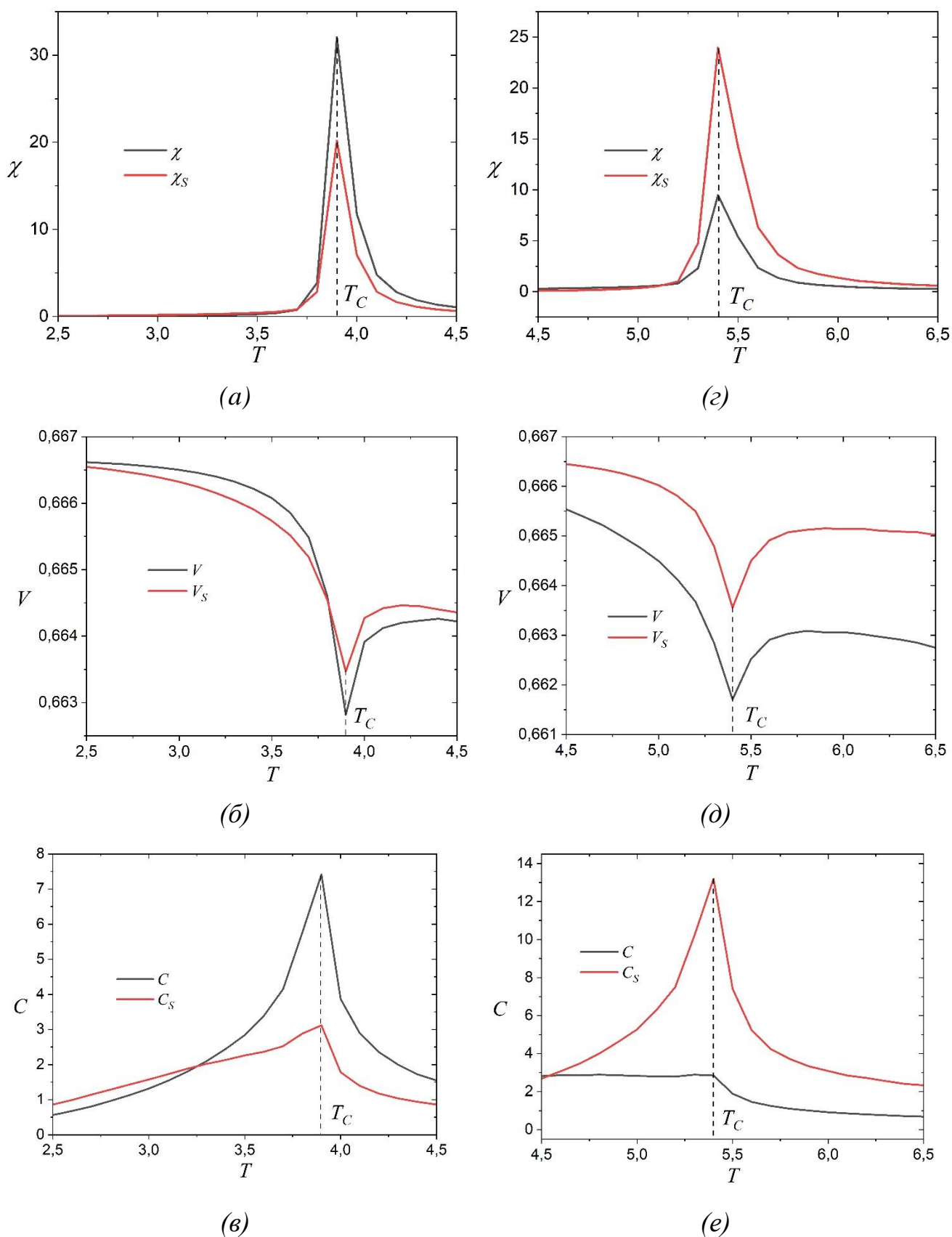


Рисунок 4.2 – Графики зависимости объемных и поверхностных магнитных восприимчивостей, энергетических кумулянтов и теплоемкостей для сплошной пленки толщиной $D = 4$ при $R = 1,0$ (а, б, в, соответственно), $R = 2,0$ (г, д, е, соответственно).

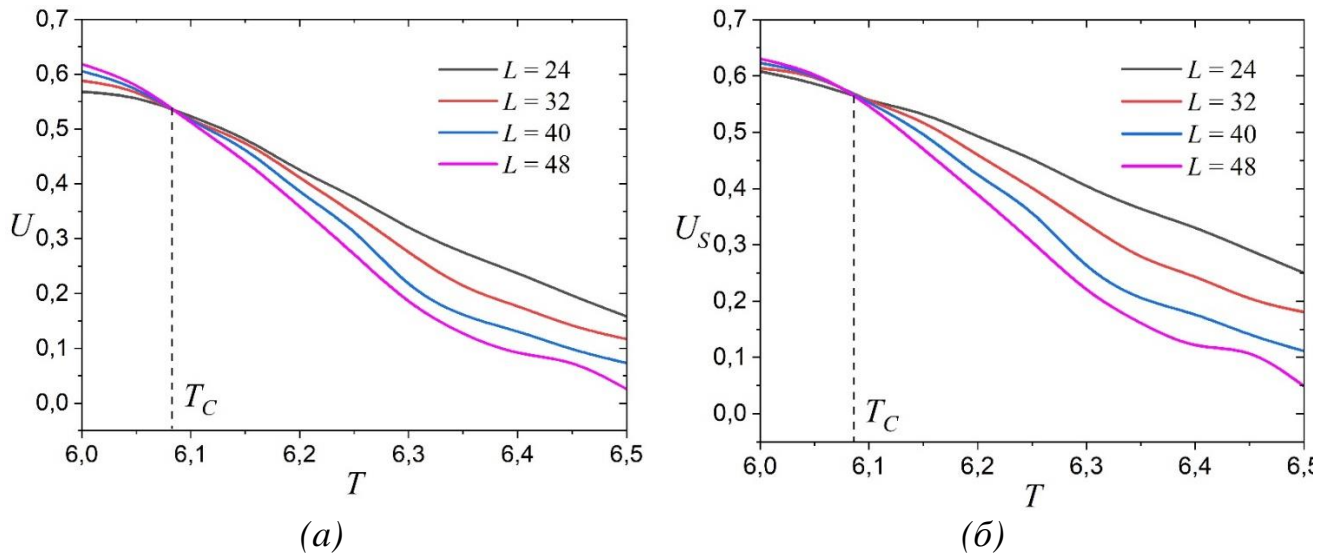


Рисунок 4.3 – График зависимости объемных и поверхностных кумулянтов от температуры для пленки толщиной $D = 4$ при $R = 2,0$: а) объемный кумулянт Биндера U , б) поверхностный кумулянт Биндера U_s .

Расчеты показывают, что увеличение отношения обменных интегралов R приводит к росту температуры Кюри. Повышение температуры является следствием увеличения энергии взаимодействия между спинами, так как для переворота отдельного спина требуется большая тепловая энергия. Зависимость критической температуры от отношения обменных интегралов показана на фазовой диаграмме (Рисунок 4.4).

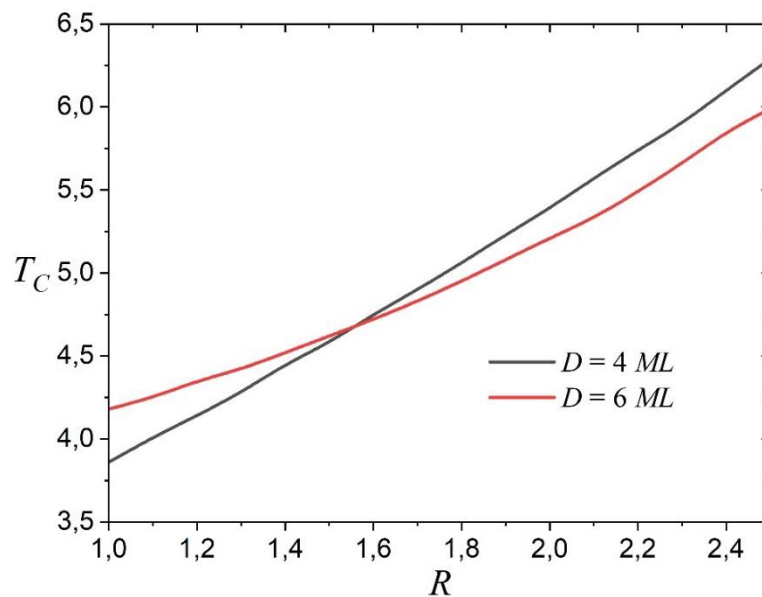


Рисунок 4.4 – Фазовая диаграмма для сплошных пленок толщиной $D = 4 ML$ и $D = 6 ML$.

Как видно из рисунка 4.4, критическая температура растет с увеличением толщины пленки. При этом скорость роста температуры фазового перехода у пленки толщиной $D = 4 ML$ выше, чем у пленки с $D = 6 ML$. Этот эффект можно объяснить тем, что поверхностный слой оказывает большее влияние на поведение системы в целом, так как составляет половину объема системы. Для пленок толщиной $D = 6 ML$ поверхностный слой составляет только третью часть системы. Кривые фазовых переходов пересекаются при значении $R = 1,55$.

На следующем шаге исследовались тонкие ферромагнитные пленки толщиной $D = 4 ML$ и $D = 6 ML$ с решеткой антиточек. Фазовые диаграммы для пленок толщиной $D = 4 ML$ и $D = 6 ML$ и различного значения размера пор представлены на рисунке 4.5.

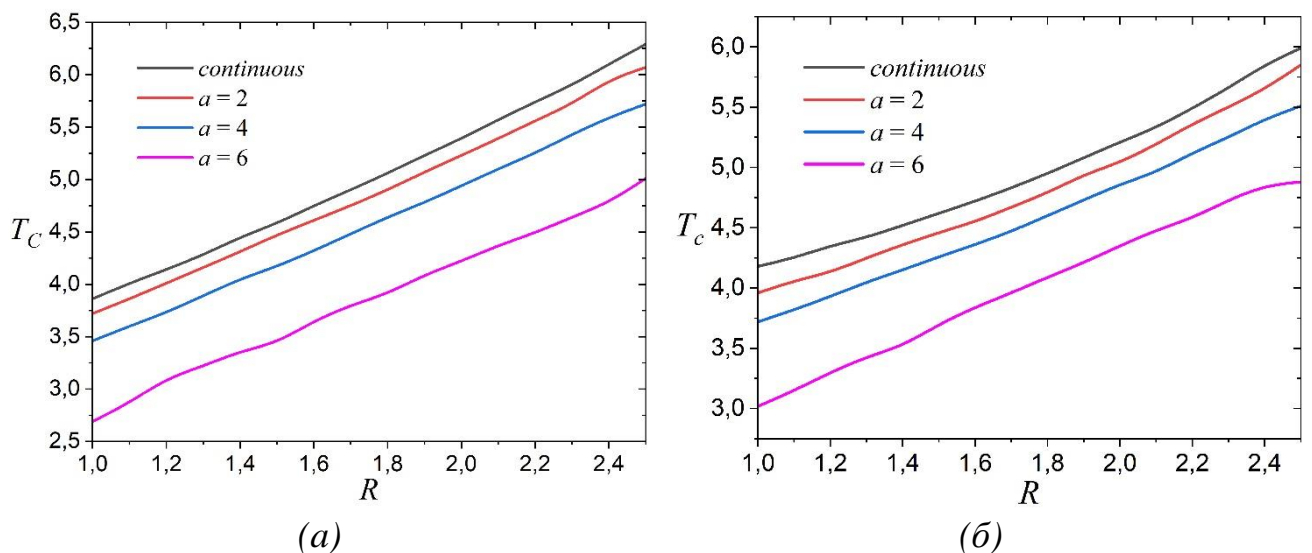


Рисунок 4.5 – Фазовые диаграммы для пленок толщиной $D = 4 ML$ (а) и $D = 6 ML$ (б) при различном значении размера пор.

Как видно из рисунка 4.5, появление решетки антиточек снижает температуру фазового перехода. Причем увеличение размера пор приводит к понижению температуры Кюри. Этот эффект обусловлен уменьшением общей энергии взаимодействия между спинами системы. Добавление решетки антиточек увеличивает площадь свободной поверхности. При этом поверхностные спины имеют меньшее количество ближайших соседей, что снижает общую внутреннюю

энергию системы. В результате требуется меньшая энергия теплового движения атомов для переворота одного спина и разупорядочивания системы.

4.3.1.2. Пленки толщиной $D \geq 7 ML$

Для сплошных пленок толщиной $D \geq 7 ML$ фазовая диаграмма сплошной пленки имеет более сложный вид. Для этой толщины пленки возможен поверхностный фазовый переход. При поверхностном фазовом переходе происходит упорядочивание спинов в поверхностном моноатомном слое, при этом основной объем системы остается в парамагнитной фазе. Система полностью переходит в ферромагнитную фазу при более низкой температуре. Этот фазовый переход получил название экстраординарного. Различие температур объемного и поверхностного переходов можно четко наблюдать на графиках зависимости объемных и поверхностных магнитной восприимчивости, теплоемкости и энергетических кумулянтов от температуры. Примеры таких графиков для случая $D = 16, L = 48$ и $R = 2,0$ приведены на рисунке 4.6.

Графики на рисунках 4.6(б) и 4.6(в) явно показывают различие температур фазового перехода в основном объеме и на поверхности системы. Поверхностные спины упорядочиваются при более высокой температуре. Если охлаждать систему из парамагнитного состояния, то сначала происходит фазовый переход в поверхностном моноатомном слое, при этом спины под поверхностью остаются в парамагнитной фазе. При более низкой температуре происходит переход в ферромагнитное состояние всей пленки. Анализ температур из графика магнитной восприимчивости (Рисунок 4.6(а)) является более сложным. Зависимость поверхностной магнитной восприимчивости от температуры демонстрирует один ярко выраженный пик, соответствующий поверхностному фазовому переходу. График для объемной восприимчивости имеет два максимума. Первый, более высокий максимум, возникает при поверхностном фазовом переходе и обусловлен взаимодействием между поверхностными спинами и более глубокими слоями. Второй, более низкий, соответствует экстраординарному фазовому переходу в основном объеме системы.

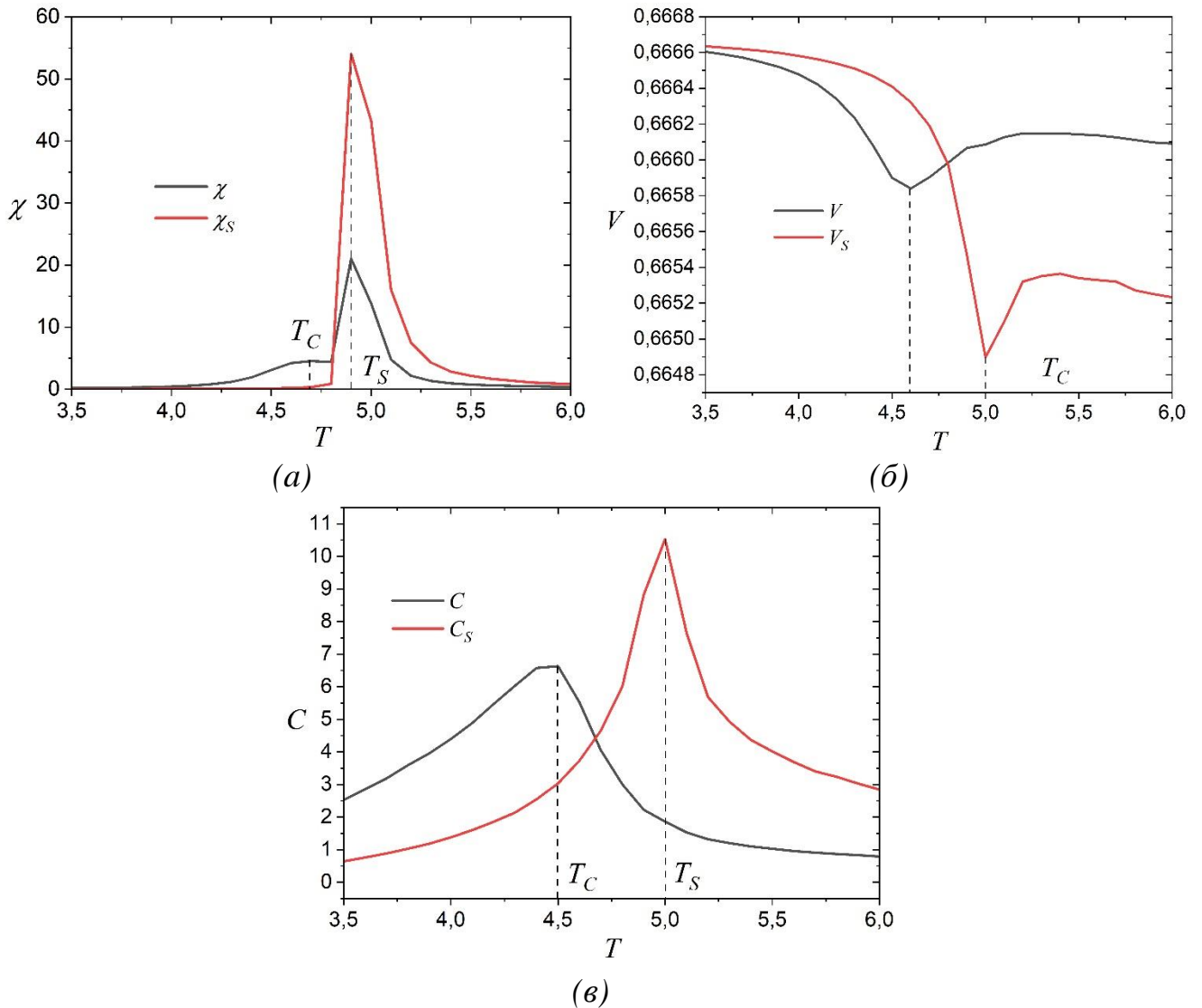


Рисунок 4.6 – Графики зависимости объемных и поверхностных магнитных восприимчивостей (а), энергетических кумулянтов (б) и теплоемкостей (в) для сплошной пленки толщиной $D = 16$, $L = 48$ при $R = 2,0$.

Начиная с толщины $D = 7 ML$ на фазовой диаграмме сплошной пленки появляются три фазы: объемно неупорядоченная поверхностно неупорядоченная ($BDSO$), объемная упорядоченная поверхностно упорядоченная ($BOSO$), объемно неупорядоченная поверхностно упорядоченная фаза ($BOSD$). Эти три фазы разделены линиями фазовых переходов: $BDSO/BOSO$ – обычный фазовый переход (ordinary), $BDSO/BDSO$ – поверхностный фазовый переход (surface), $BDSO/BOSO$ – экстраординарный фазовый переход (extraordinary). Три линии фазовых переходов пересекаются в трикритической точке, получившей название специального

фазового перехода (special). Названия для фазовых переходов были введены в статье [71]. Каждый фазовый переход имеет свою критическую температуру: T_C – температура обычного фазового перехода. T_S – температура поверхностного фазового перехода. T_e – температура экстраординарного фазового перехода. T_{sp} – температура специального фазового перехода. Следует отметить, что все фазовые переходы относятся ко второму роду [13]. Фазовые диаграммы для пленок толщиной $D = 7 ML$ для сплошной пленки и пленки с решеткой антиточек при различной величине пор представлены на рисунке 4.7. Как видно из рисунка 4.7, поверхностный фазовый переход возможен в сплошной пленке и пленке с порами размером $a = 2$. Для решетки антиточек с размера пор больше или равно $a = 3$ поверхностный фазовый переход на фазовой диаграмме отсутствует.

Сравнение фазовых диаграмм на рисунках 4.7(а) и 4.7(б) показывает, что решетка антиточек уменьшает область диаграммы, в которой наблюдается фаза *BDSO*, что приводит к снижению разницы между температурами специального и экстраординарного фазовых переходов. Также повышается значение отношения объемных интегралов R , при котором происходит специальный фазовый переход. Для пленок с решеткой антиточек, имеющих поры размером более $a = 3$ реализуется только обычный фазовый переход, а фаза *BDSO* отсутствует. Повышение размера пор снижает температуру фазового перехода при малых значениях R и повышает при больших R . Увеличение размера пор ведет к росту скорости повышения температуры Кюри. Снижение критической температуры при малых R можно объяснить увеличением площади свободной поверхности. На поверхности спины имеют меньшее количество соседей, вследствие чего снижается их энергия обменного взаимодействия. При увеличении R повышается поверхностный обменный интеграл, энергия взаимодействия спинов на поверхности становится больше, чем в объеме системы. Несмотря на снижение количества соседей, в этом случае, общая энергия взаимодействия спинов повышается, что ведет к росту температуры Кюри.

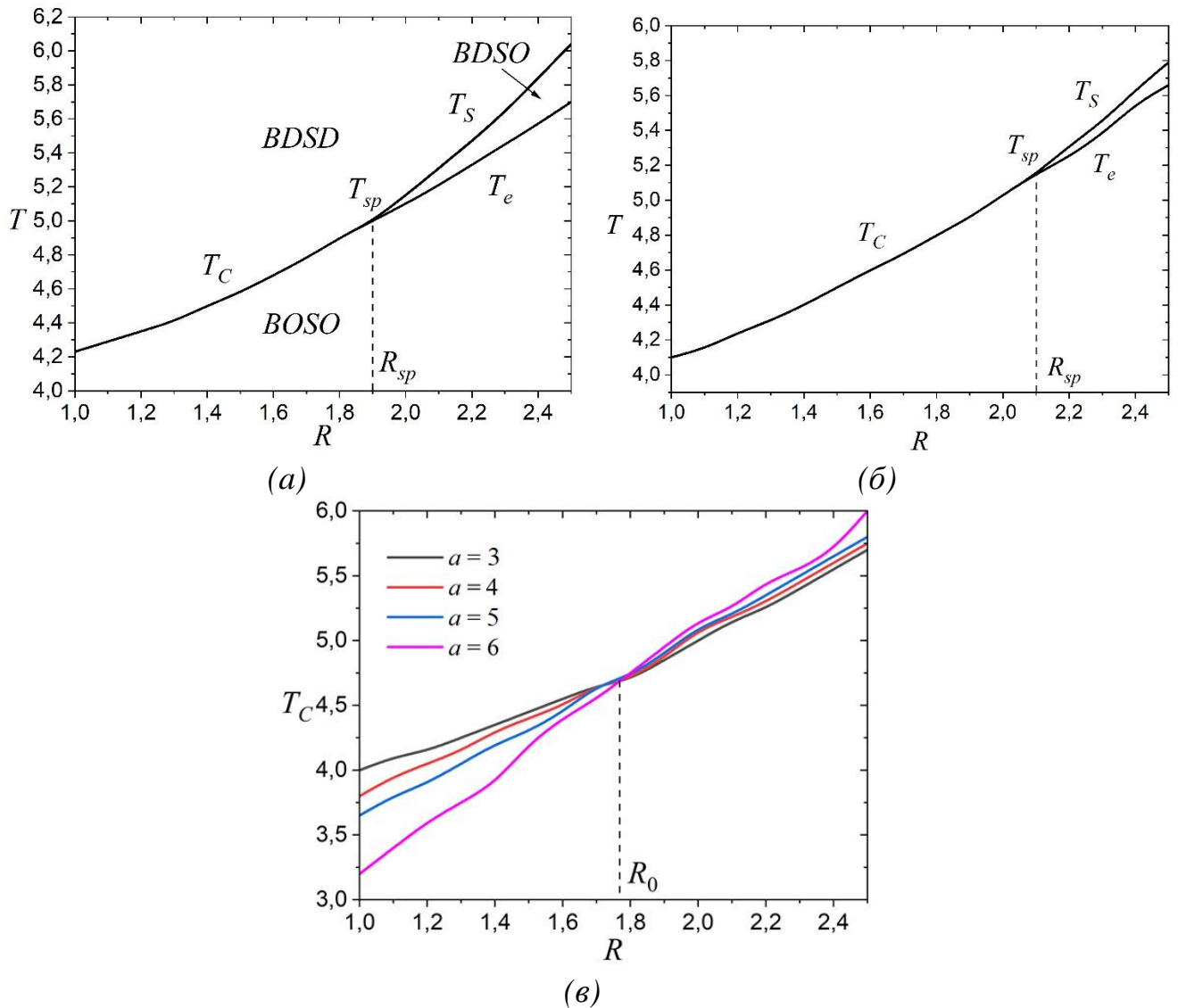


Рисунок 4.7 – Фазовые диаграммы сплошной ферромагнитной пленки толщиной $D = 7 ML$: а) непрерывная пленка, б) $a = 2$, в) $a = 3$, $a = 4$, $a = 5$ и $a = 6$. T_C – температура обычного фазового перехода. T_S – температура поверхностного фазового перехода. T_e – температура экстраординарного фазового перехода. T_{sp} – температура специального фазового перехода.

Повышение размера пор снижает температуру фазового перехода при малых значениях R и повышает при больших R . Увеличение размера пор ведет к росту скорости повышения температуры Кюри. Снижение критической температуры при малых R можно объяснить увеличением площади свободной поверхности. На поверхности спины имеют меньшее количество соседей, вследствие чего снижается их энергия обменного взаимодействия. При увеличении R повышается поверхностный обменный интеграл, энергия взаимодействия спинов на

поверхности становится больше, чем в объеме системы. Несмотря на снижение количества соседей, в этом случае, общая энергия взаимодействия спинов повышается, что ведет к росту температуры Кюри. Графики зависимости температуры T_C фазового перехода от отношения обменных интегралов R пересекаются в одной точке R_0 . При этом значении отношения обменных интегралов размер пор не оказывает влияния на температуру Кюри. Точка R_0 показывает состояние, при котором снижение количества соседей поверхностных спинов компенсируется увеличением поверхностного обменного интеграла.

Аналогичным образом выглядят фазовые диаграммы для пленок толщиной $D = 8 ML$ и $D = 10 ML$ (Рисунок 4.8). Качественно наблюдается те же закономерности, что и для пленок с толщиной $D = 7 ML$, но при этом увеличивается область фазы $BDSO$ и, как следствие, разность температур поверхностного и объемного фазовых переходов.

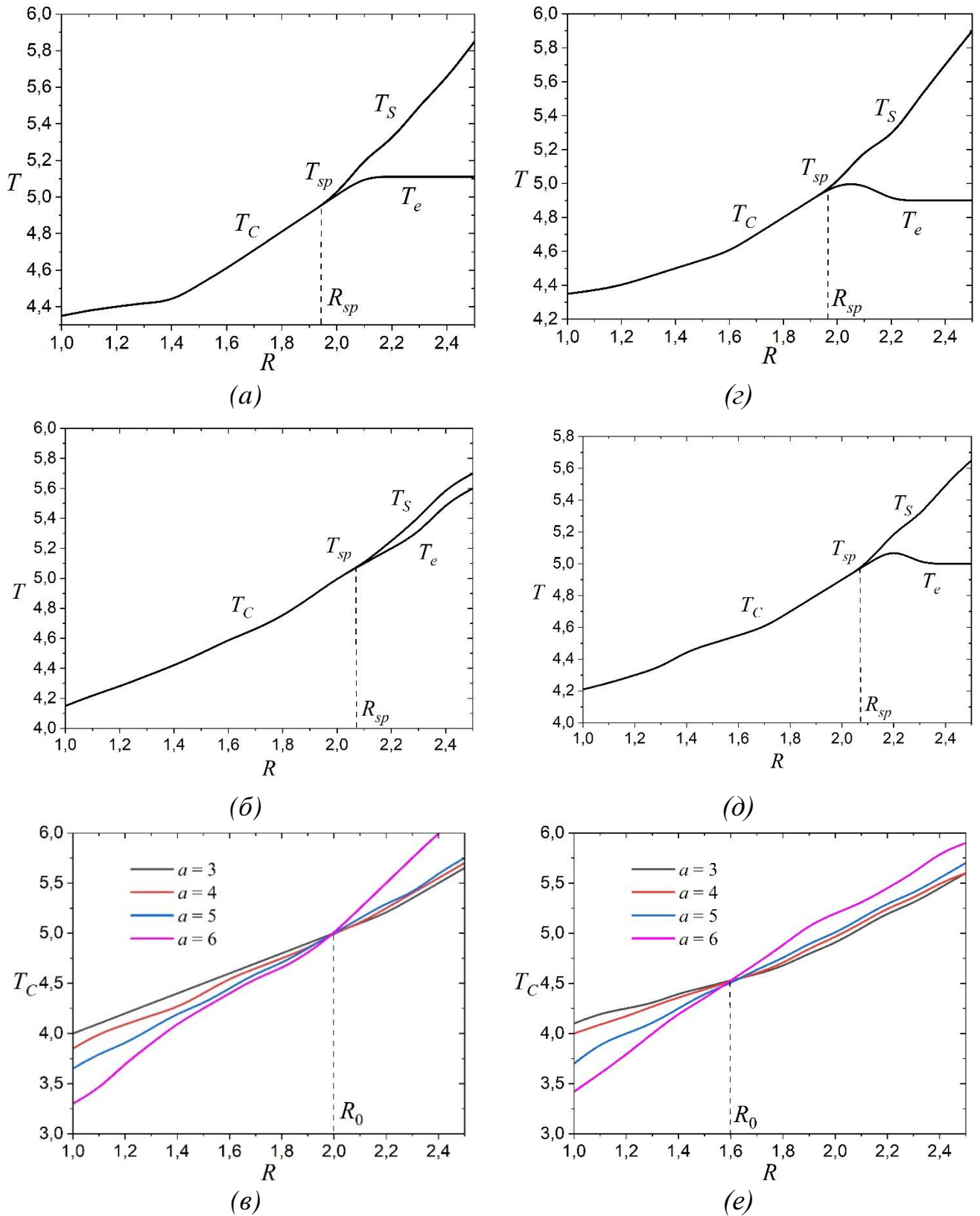


Рисунок 4.8 – Фазовые диаграммы сплошных ферромагнитных пленок для непрерывных пленок, $a = 2, 3, 4, 5, 6$ при толщине $D = 8 ML$ (а, б, в соответственно) и $D = 10 ML$ (г, д, е соответственно).

Изменения в структуре фазовых диаграмм можно наблюдать при толщине пленки от $D = 11 ML$ до $D = 13 ML$. Фазовая диаграмма для пленки с $D = 12 ML$ и различного значения размера пор приведена на рисунке 4.9. В этом случае поверхностный фазовый переход происходит при размере пор до $a = 3$ (Рисунок 4.9(в)). При больших размерах пор ($a \geq 4$) наблюдается только обычный фазовый переход.

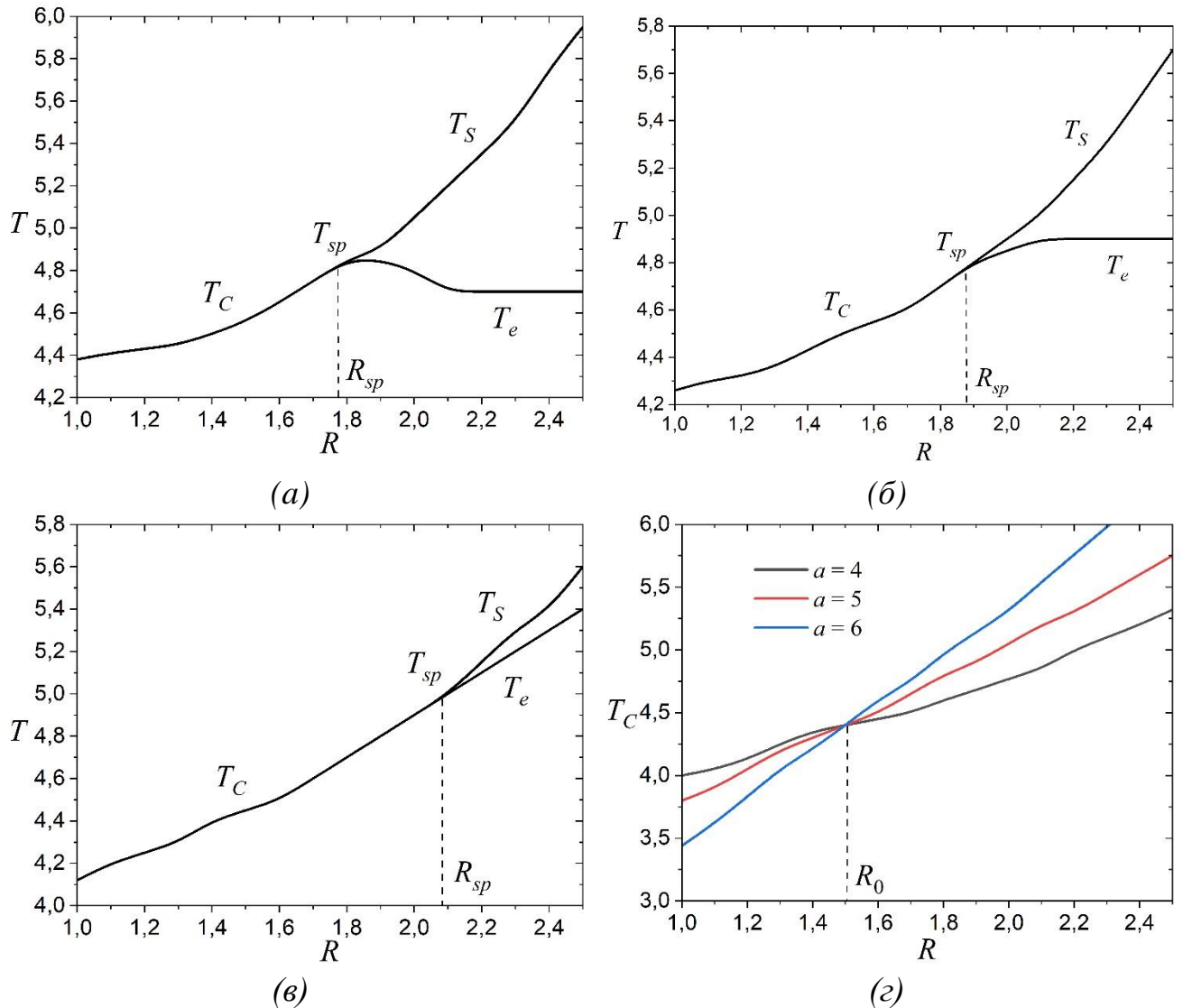


Рисунок 4.9 – Фазовые диаграммы сплошной ферромагнитной пленки толщиной $D = 12 ML$: а) непрерывная пленка, б) $a = 2$ в) $a = 3$ г) $a = 4$, $a = 5$, $a = 6$.

Следующие качественные изменения происходят при толщине пленки от $D = 14 ML$ до $D = 16 ML$. Фазовые диаграммы для $D = 14 ML$ и $D = 16 ML$ приведены на рисунках 4.10 и 4.11. Для пленок с толщиной в этом интервале

поверхностный фазовый переход наблюдается при размере пор $a = 4$ и меньше. Для пор размером $a \geq 5$ происходит только обычный фазовый переход.

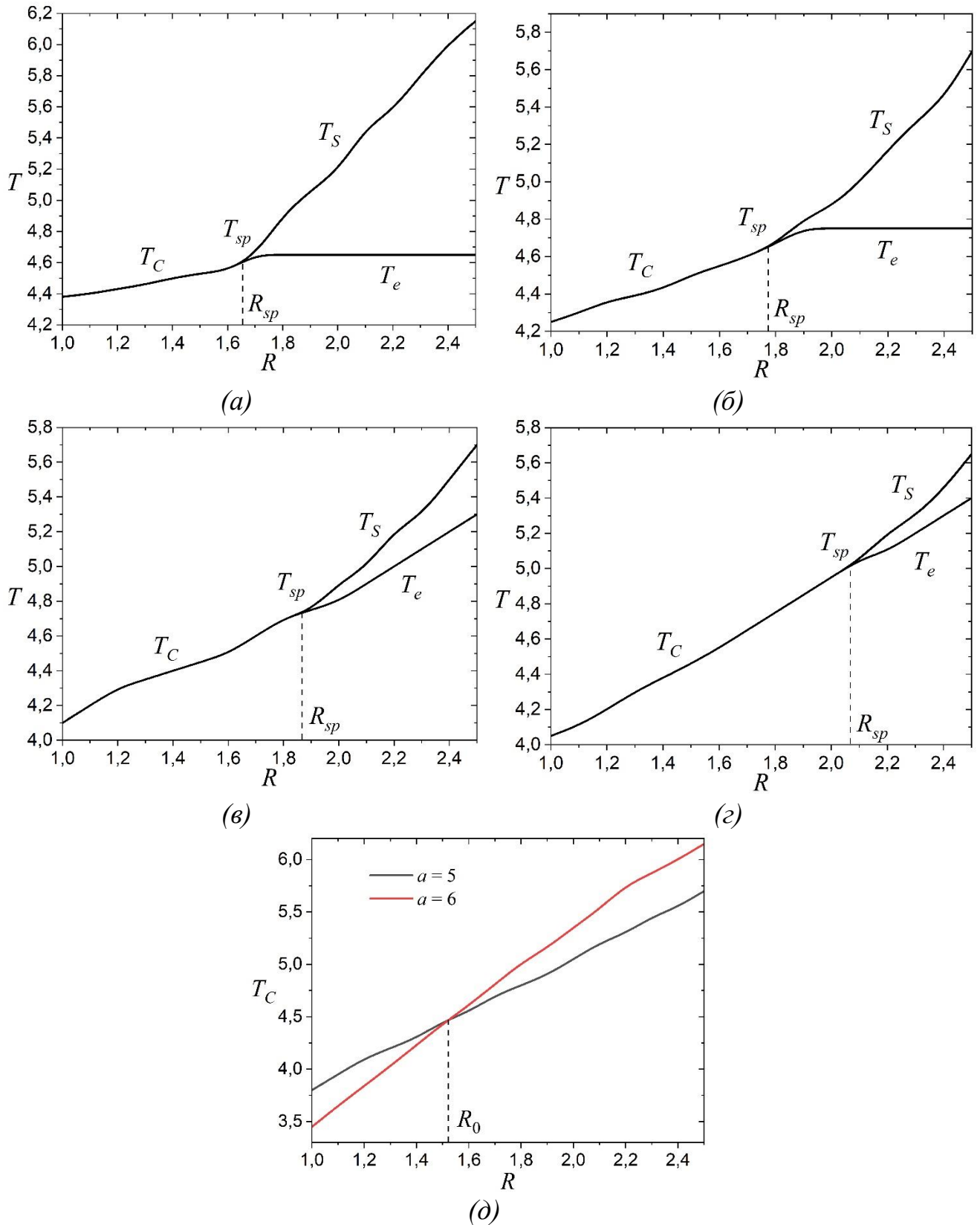


Рисунок 4.10 – Фазовые диаграммы сплошной ферромагнитной пленки толщиной $D = 14 ML$: а) непрерывная пленка, б) $a = 2$, в) $a = 3$ г) $a = 4$, д) $a = 5$ и $a = 6$.

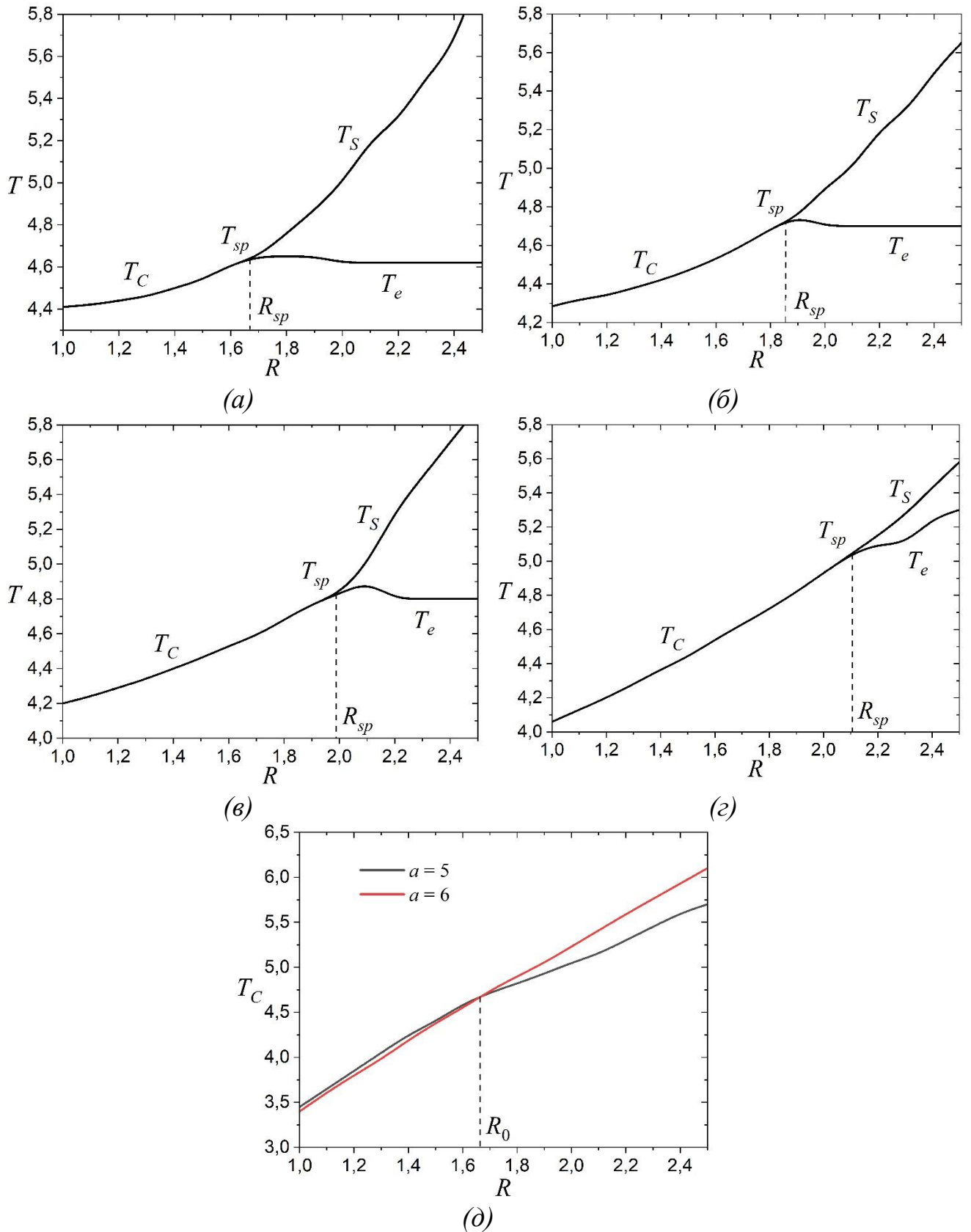


Рисунок 4.11 – Фазовые диаграммы сплошной ферромагнитной пленки толщиной $D = 16 ML$: а) непрерывная пленка, б) $a = 2$, в) $a = 3$ г) $a = 4$, д) $a = 5$ и $a = 6$.

Отсутствие поверхностного фазового перехода во всех пленках с порами размером $a = 5$ и $a = 6$ объясняется значительным увеличением площади поверхности. Количество поверхностных спинов становится сопоставимым или даже превышает количество объемных спинов. В результате наблюдается такая же картина, как и для пленок толщиной $D \leq 6 ML$.

Рассмотрим особенности каждого из возможных фазовых переходов. Для обычного фазового перехода характерен рост температуры Кюри при увеличении отношения обменных интегралов. Скорость роста температуры обычного фазового перехода определяется толщиной пленки и размерами пор. Для каждой толщины пленки существует значение R_0 , при котором решетка антиточек не влияет на температуру Кюри. График зависимости R_0 от толщины пленки D представлен на рисунке 4.12.

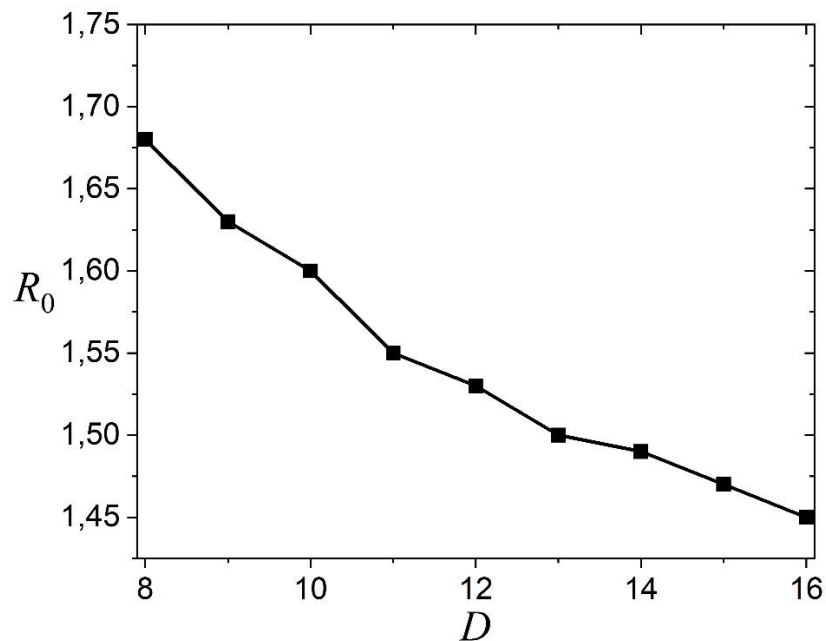


Рисунок 4.12 – График зависимости R_0 от толщины пленки D .

Как видно из рисунка 4.12, увеличение толщины пленки снижает величину поверхностного обменного интеграла, при котором решетка антиточек не оказывает влияния на обычный фазовый переход в системе. Эта закономерность связана с уменьшением влияния поверхностной энергии на поведение системы при увеличении толщины пленки.

Рассмотрим поверхностный фазовый переход. Сравнение фазовых диаграмм пленок различной толщины показывает, что существует максимальный размер пор a_m , для которого возможен поверхностный фазовый переход. Причем величина a_m зависит от толщины пленки. График этой зависимости представлен на рисунке 4.13.

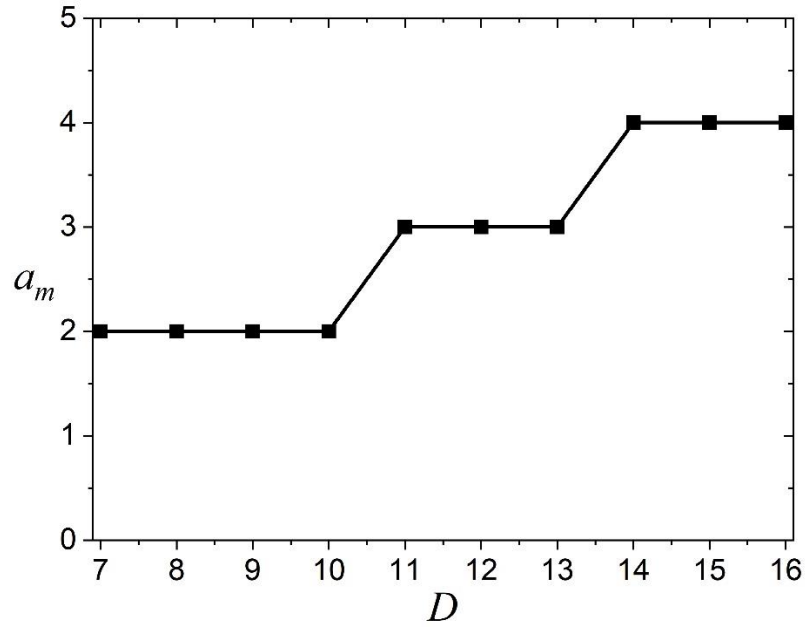


Рисунок 4.13 – График зависимости максимального размера поры a_m , при котором возможен поверхностный фазовый переход, от толщины пленки D .

Как видно из графика на рисунке 4.13 зависимость максимального размера пор, при котором реализуется поверхностный фазовый переход, имеет ступенчатый вид. Если поры имеют размер, не превышающий $a = 2$, то поверхностный фазовый переход возможен во всех пленках с толщиной не менее $D = 7 ML$. Если размер пор равен $a = 3$, то для поверхностного фазового перехода пленка должна иметь толщину не менее $D = 11 ML$. В пленках с решеткой пор, имеющих размер $a = 4$ поверхностный фазовый переход присутствует на фазовой диаграмме при толщине не менее $D = 11 ML$. Следует отметить, что расчеты проводились при периоде решетки антиточек $d = 8$. При большем значении периода размеры пор могут быть больше, но ступенчатая зависимость для отношения a_m/d от толщины пленки D сохраняется.

Толщина пленки D и размер пор a также влияют на зависимость температуры экстраординарного фазового перехода T_e от отношения обменных интегралов R . Для сплошных пленок и пленок с решеткой антиточек малого размера наблюдается небольшой рост температуры экстраординарного фазового перехода вблизи трикритической точки. После этого, с увеличением R величина T_e сначала немного снижается, а затем выходит на постоянное значение. Для пленок с порами большого размера температура экстраординарного фазового перехода T_e увеличивается с ростом R . Рост температуры обусловлен взаимодействием с поверхностными спинами. Для пленок с большими порами влияние упорядочивания поверхностных спинов на ориентацию объемных спинов сильнее.

Из фазовых диаграмм видно, что отношения обменных интегралов R_{sp} , соответствующего специальному фазовому переходу, также зависит от толщины пленки и размера пор. Графики зависимости R_{sp} от толщины для сплошной пленки и пленок с решеткой антиточек различного размера приведены на рисунке 4.14.

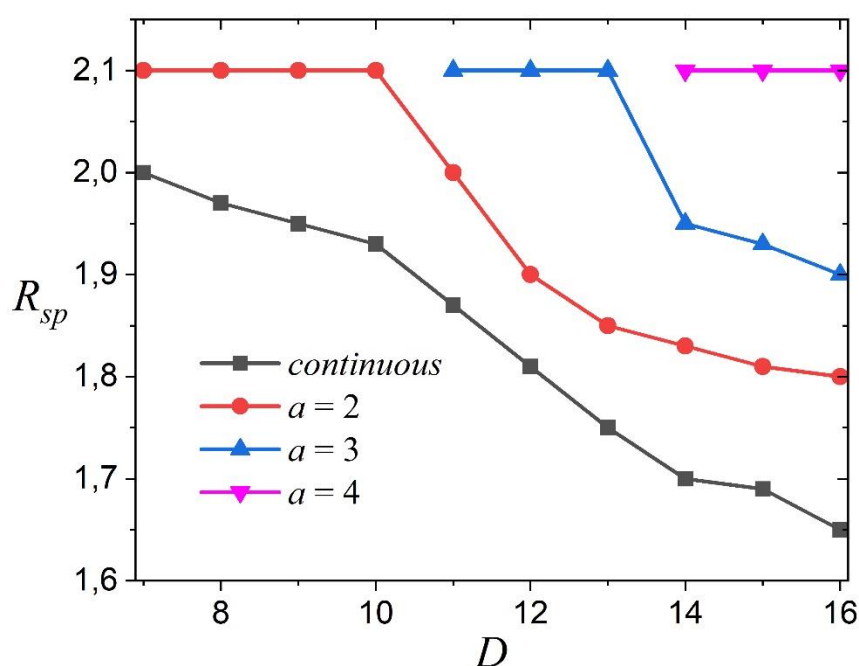


Рисунок 4.14 – Графики зависимости R_{sp} от толщины D для сплошной пленки и пленок с решеткой антиточек различного размера a .

Как видно из графика на рисунке 4.14, значение R_{sp} снижается с ростом толщины пленки. Данное значение для полуограниченных систем $R_{sp} = 1,55$ [28]. Также следует отметить, что для непрерывных пленок и пленок с решеткой антиточек максимальное значение отношения обменных интегралов в точке специального фазового перехода одно и то же, и равно $R_{sp} = 2,1$.

4.3.2 Процесс перемагничивания

Процесс перемагничивания моделировался для пленок различной толщины с линейными размерами в плоскости OXY равными $L \times L = 64 \times 64$. Толщина пленки изменялась от $D = 4 ML$ до $D = 16 ML$ с шагом $\Delta D = 2 ML$. Исследовались как сплошные пленки, так и пленки с решеткой антиточек. Период решетки был равен $d = 8$. Размеры квадратных пор принимали значения $a = 2$, $a = 4$ и $a = 6$. Отношение обменных интегралов варьировалось от $R = 1,0$ до $R = 2,5$ с шагом $\Delta R = 1,0$. Напряженность магнитного поля изменялась от $h = -1,0$ до $h = 1,0$ с шагом $\Delta h = 0,01$. Для установления начального равновесия выполнялось 10^5 шагов Монте-Карло на спин. При переходе к новому значению напряженности магнитного поля выполнялось 100 шагов Монте-Карло на спин.

При моделировании перемагничивания исследовались пленки, находящиеся целиком в ферромагнитной фазе. Для этого была выбрана температура $T = 2,5$. На первом этапе рассматривались сплошные пленки. Расчеты показали, что ширина петли гистерезиса увеличивается с ростом отношения обменных интегралов для пленок любой толщины. Примеры петли гистерезиса для сплошных пленок толщиной $D = 6 ML$ и $D = 12 ML$ при различном отношении обменных интегралов представлены на рисунке 4.15.

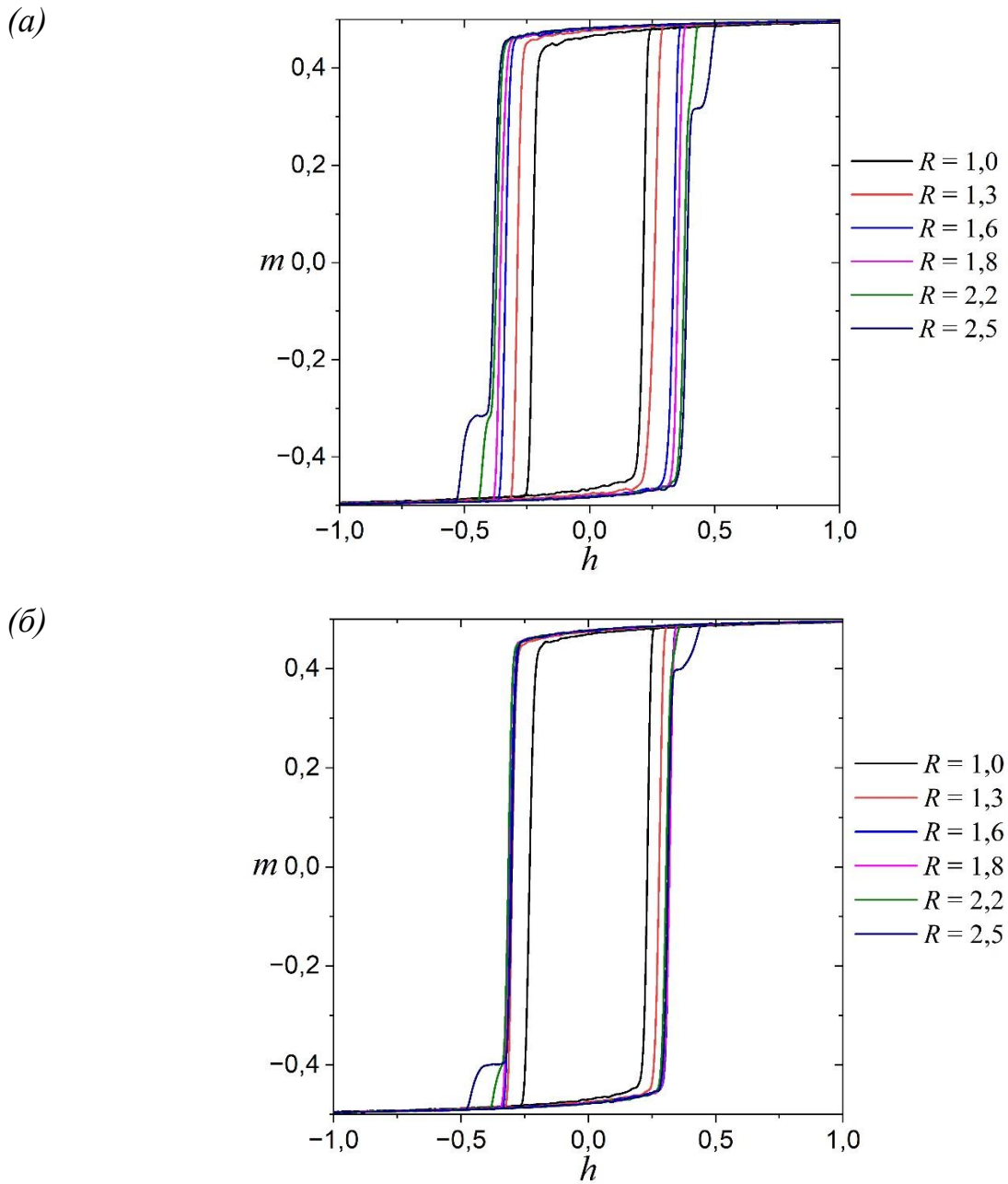


Рисунок 4.15 – Петли гистерезиса для сплошных пленок толщиной $D = 6 ML$ (а) и $D = 12 ML$ (б) при различном отношении обменных интегралов R .

Из рисунка 4.15 видно, что рост поверхностного обменного интеграла приводит к увеличению ширины петли гистерезиса и росту коэрцитивной силы H_C . Данная зависимость объясняется более сильным обменным взаимодействием поверхностных спинов, препятствующих изменению направления намагниченности всей пленки. Сравнение рисунков 4.15(а) и 4.15(б) показывает, что при увеличении толщины пленки влияние поверхностного магнетизма

снижается и размер петли гистерезиса изменяется меньше. Такая же закономерность наблюдается для пленок с решеткой антиточек. Зависимости коэрцитивной силы H_C от отношения обменных интегралов для пленок различной толщины и решеткой антиточек с порами различного размера представлены на рисунке 4.16.

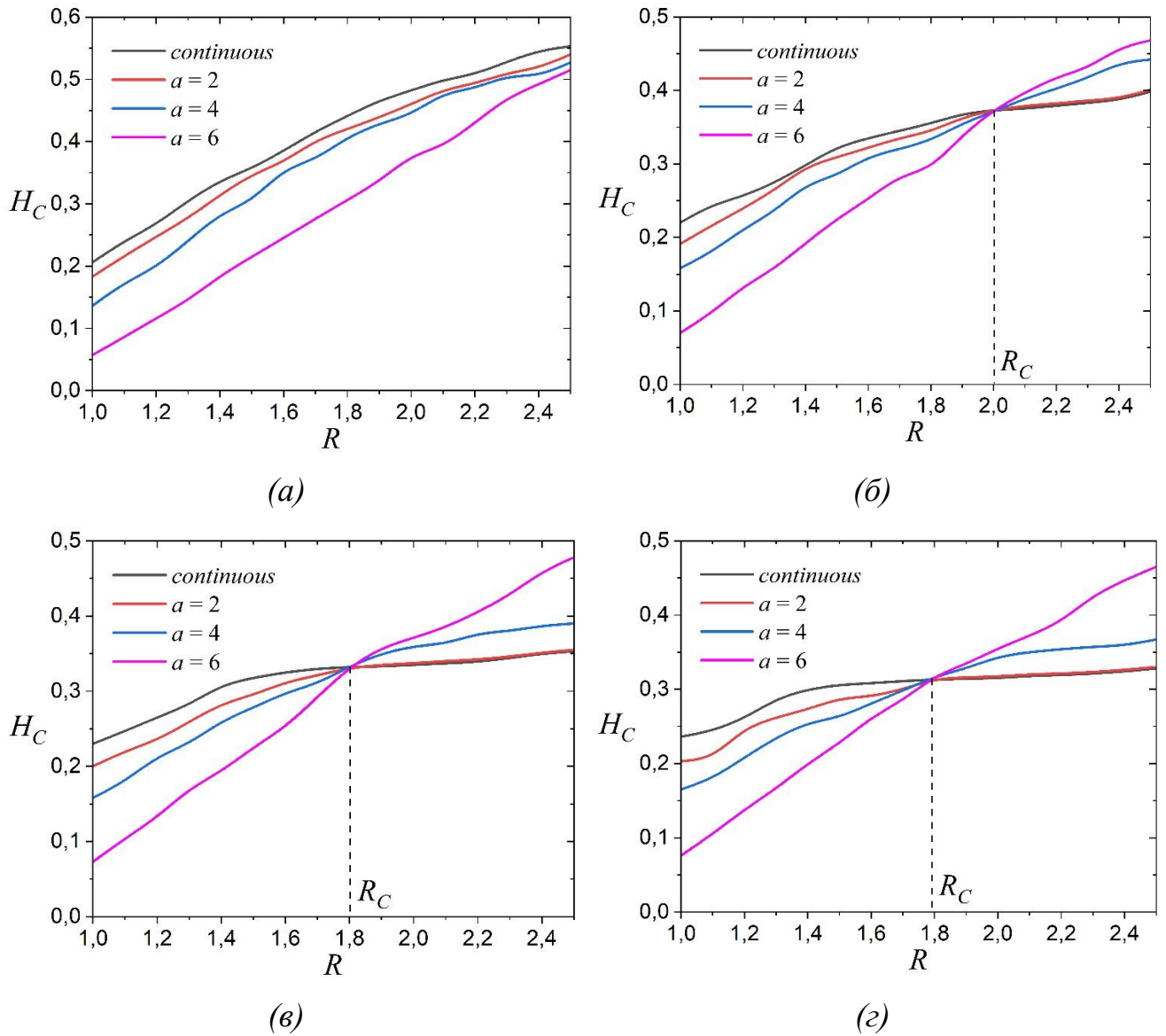


Рисунок 4.16 – Зависимости коэрцитивной силы H_C от отношения обменных интегралов для пленок различной толщины и решеткой антиточек с порами различного размера a : а) $D = 4 ML$, б) $D = 6 ML$, в) $D = 8 ML$, г) $D = 10 ML$.

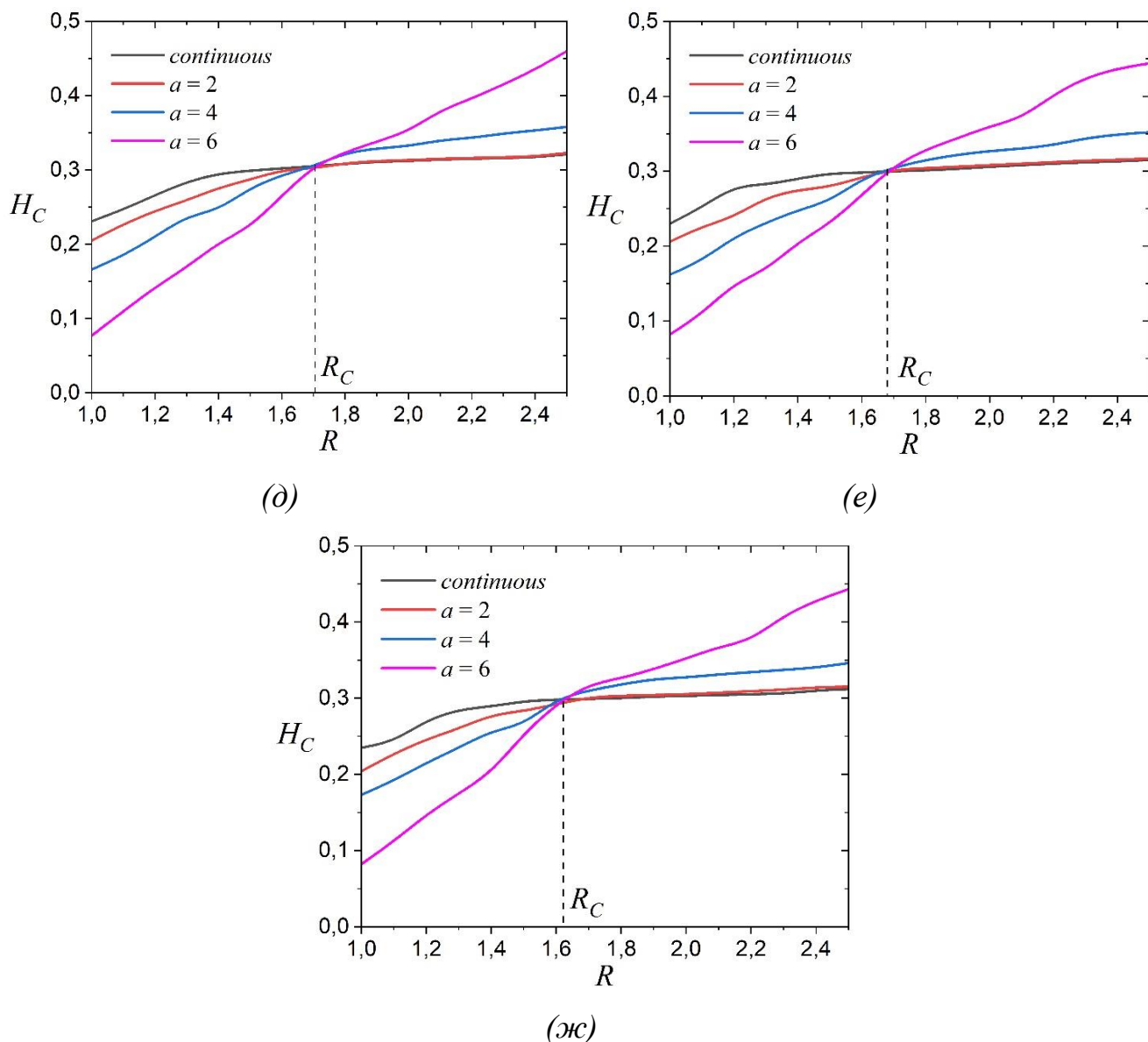


Рисунок 4.16 (Продолжение) – Зависимости коэрцитивной силы H_C от отношения обменных интегралов для пленок различной толщины и решеткой антиточек с порами различного размера a : д) $D = 12 ML$, е) $D = 14 ML$, ж) $D = 16 ML$.

Как видно из рисунка 4.16, коэрцитивная сила зависит от размера пор. При равенстве обменных интегралов на поверхности и в объеме системы добавление решетки антиточек снижает коэрцитивность пленки. Однако с увеличением поверхностного обменного интеграла коэрцитивная сила растет. Причем скорость ее роста повышается с увеличением размера пор. При большом значении отношения обменных интегралов добавление решетки антиточек повышает коэрцитивную силу. Эта зависимость приводит к увеличению ширины петли

гистерезиса при добавлении решетки антиточек. Примеры петель гистерезиса для пленки толщиной $D = 16 ML$ различного размера пор и двух значений отношения обменных интегралов приведены на рисунке 4.17.

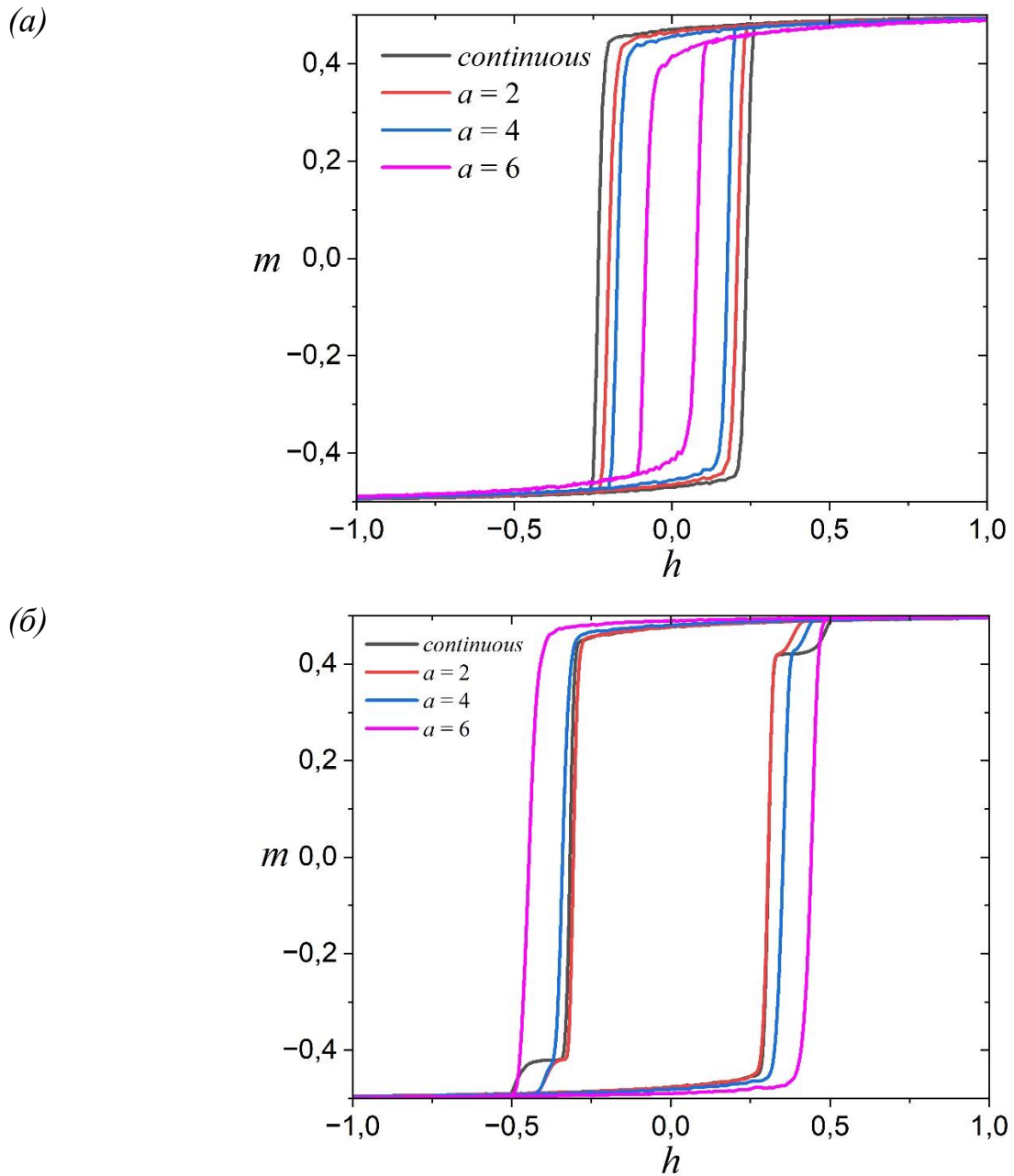


Рисунок 4.17 – Петли гистерезиса для пленок толщиной $D = 16 ML$ с различным значением величины пор a при двух значениях отношения обменных интегралов: а) $R = 1,0$, б) $R = 2,5$.

На рисунке 4.16 также видно, что пленок любой толщины существует критическое значение R_C , при котором пересекаются графики зависимости коэрцитивной силы от отношения обменных интегралов. При величине $R = R_C$

коэрцитивная сила пленки на зависит от размера пор решетки антиточек. Значение R_C изменяется при увеличении толщины пленки. График зависимости R_C от толщины пленки представлен на рисунке 4.18.

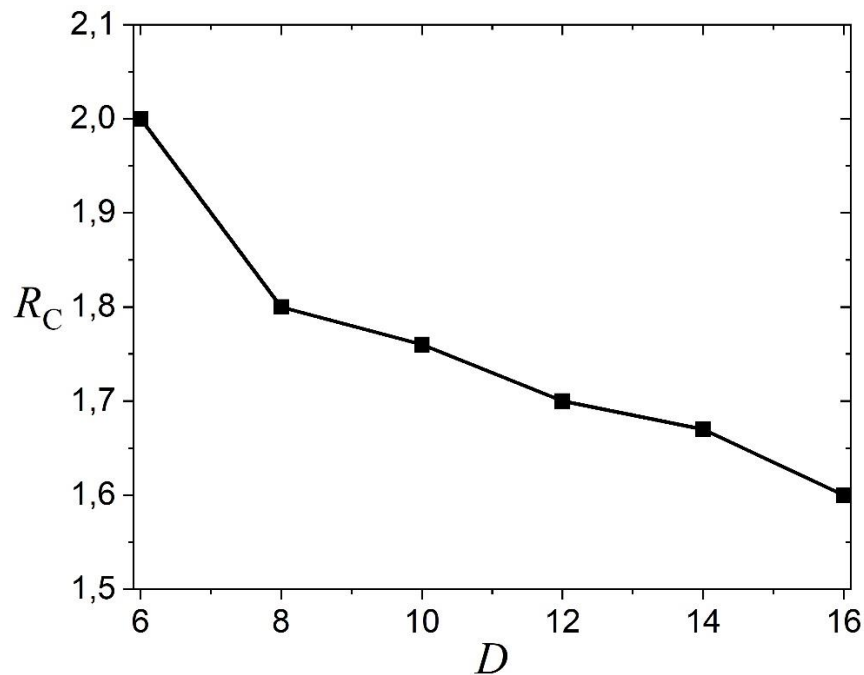


Рисунок 4.18 – Зависимость критического значения R_C от толщины пленки D .

График на рисунке 4.18 показывает, что критическое значение R_C убывает с ростом толщины пленки D . Причем скорость убывания R_C снижается с ростом толщины пленки, и можно ожидать его выхода на постоянное значение, начиная с некоторой толщины пленки.

Аналогичная зависимость наблюдается для энергии перемагничивания. Графики зависимости энергии перемагничивания E_m от отношения обменных констант при различном значении размера пор представлены на рисунке 4.19.

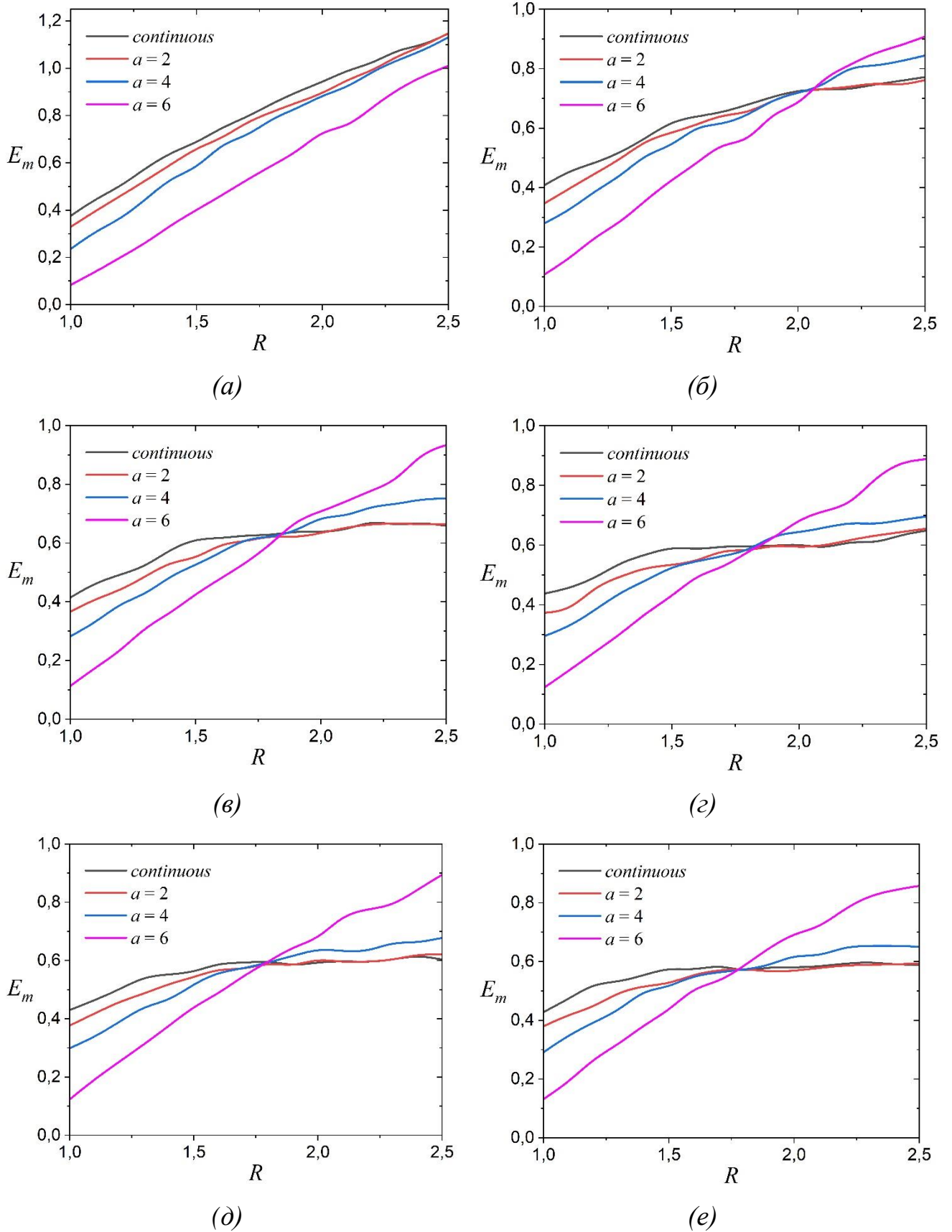


Рисунок 4.19 – Зависимости энергии перемagnetизации E_m от отношения обменных констант для пленок различной толщины и решеткой антиточек с порами различного размера a : а) $D = 4 ML$, б) $D = 6 ML$, в) $D = 8 ML$ г) $D = 10 ML$, д) $D = 12 ML$ е) $D = 14 ML$.

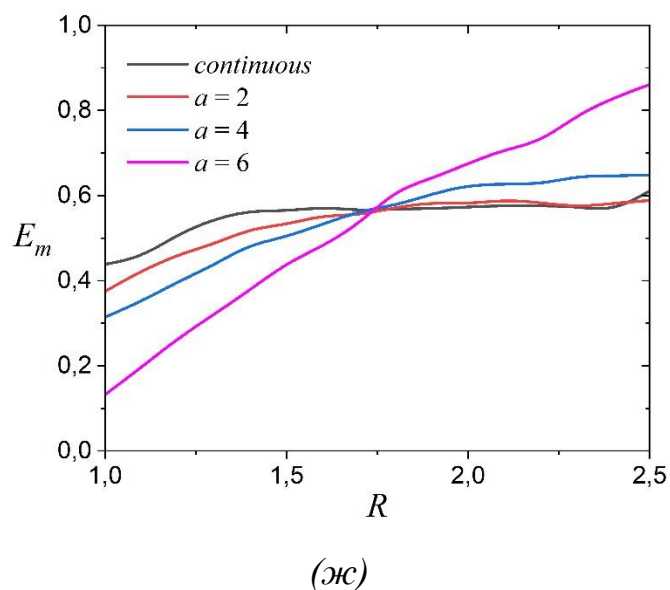


Рисунок 4.19 (Продолжение) – Зависимости энергии перемагничивания E_m от отношения обменных констант для пленок различной толщины и решеткой антиточек с порами различного размера a : ж) $D = 16 ML$.

Как видно из рисунка 4.19 энергия перемагничивания увеличивается с ростом отношения обменных констант. Таким образом, увеличение поверхностной обменной энергии взаимодействия повышает энергию, необходимую для изменения направления намагниченности. Решетка антиточек изменяет скорость роста энергии перемагничивания. Если поверхностная обменная энергия близка к объемной, то наличие пор снижает энергию перемагничивания. Если поверхностная обменная константа значительно превышает объемную, то для перемагничивания требуется большая энергия. Эта закономерность объясняется ростом влияния поверхностного магнетизма при увеличении размера пор. Как и для коэрцитивной силы, существует критическое отношение обменных констант, при которых решетка антиточек не влияет на энергию перемагничивания. Критические значения отношения обменных констант совпадают со значениями, полученными для коэрцитивной силы.

4.4 Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными

Моделирование методом Монте-Карло тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиточек показывает, что размеры пор влияют на магнитные свойства системы. Дополнительное большое влияние на такие материалы оказывает поверхностный магнетизм. Данное влияние легко объясняется увеличением свободной поверхности системы при создании пор. Расчеты показывают, что поверхностный фазовый переход возможен в системе при выполнении двух условий. Во-первых, обменное взаимодействие между поверхностными спинами должно быть более интенсивным, чем для спинов в объеме системы. Во-вторых, количество поверхностных спинов не должно быть слишком большим по сравнению с общим количеством спинов системы. Первое требование определяет материалы, в которых возможен поверхностный фазовый переход. Расчеты из первых принципов [39, 52] показывают, что отношение обменных интегралов на поверхности и в объеме системы может изменяться в широких пределах. Данное отношение зависит от химического состава пленки и определяется его электронной структурой. Выполнение второго требования для сплошных пленок приводит к ограничениям на толщину пленок. Для пленок, которые содержат не более шести моноатомных слоев, поверхностный фазовый переход не реализуется. Влияние решетки антиточек на эти пленки сводится к снижению температуры Кюри и, как следствие, к снижению намагниченности при фиксированной температуре. Такая закономерность связана с увеличением относительного количества поверхностных спинов, имеющих меньшее количество ближайших соседей. Снижение количества соседних спинов уменьшает общую энергию системы. Такое снижение намагниченности в результате создания пор в системе наблюдалось экспериментально [38, 108]. Снижение намагниченности ферромагнитного слоя в системе $\text{Ag}(10 \text{ нм})/\text{Co}(8 \text{ нм})/\text{NiO}(2 \text{ нм})/\text{Ag}(5 \text{ нм})$ при создании в ней решетки антиточек [37]. Исследования пленок Co/CoO с решеткой антиточек [108] показало, что намагниченности ферромагнитной пленки изменяется с ростом температуры.

При низких температурах она ниже, чем у сплошной пленки, а при высоких температурах выше. Данный эффект может быть объяснен смещением точки Кюри в результате нанесения решетки антиточек.

Если толщина пленки превышает шесть моноатомных слоев, то в сплошной пленке возможен поверхностный фазовый переход. Отношение обменных интегралов, при котором температура Кюри на поверхности превышает температуру Кюри в объеме системы зависит от толщины пленки. Также от толщины пленки зависит разность температур фазового перехода на поверхности и в объеме системы. Влияние решетки антиточек на такие пленки зависит от отношения обменных интегралов на поверхности и в объеме системы. Прежде всего, решетка антиточек повышает величину отношения обменных интегралов, необходимых для поверхностного фазового перехода. При определенных размерах пор поверхностный фазовый переход становится невозможным. Для обычного фазового перехода в этих пленках решетка антиточек может как снижать, так и повышать температуру фазового перехода. Если отношение обменных интегралов близко к единице, то намагниченность системы снижается при добавлении пор в систему. Если отношение обменных интегралов больше определенного значения, то намагниченность пленки с решеткой антиточек выше, чем у сплошной пленки. Повышение намагниченности ферромагнитной пленки проявляется, например в увеличении обменного взаимодействия на интерфейсе бислойных систем FM/AFM. Поле обменного смещения увеличивается в тонких бислойных пленках IrMn/CoFe при увеличении размера пор [108]. При этом существует предельное значение размера пор, начиная с которого поведение намагниченности системы изменяется. Представленная модель подтверждает эти выводы. Для систем с размером пор больше определенного значения изменяется общий вид фазовой диаграммы, что приводит к изменению магнитных свойств системы. Увеличение намагниченности с ростом пор обнаружено также для ферромагнитного слоя пленки CoO/Co/Pd [83]. Исследования для пленок CoO/Co толщиной 30 нм и размером пор от 34 нм до 96 нм [95] показали увеличение поля обменного

смещения в 12 раз по сравнению со сплошной пленкой. Увеличение поля обменного смещения свидетельствует о росте намагниченности на поверхности пленки.

Проведем сравнение с результатами реального эксперимента для тонких ферромагнитных пленок Fe с решеткой наноразмерных пор [12]. Период кристаллической решетки железа при комнатной температуре можно принять $a_0 = 0,3$ нм. В работе [12] эксперименты проводились для пленок толщиной $D = 20$ нм = $67 ML$ с периодом решетки пор $d = 200$ нм = $667 ML$. Петли гистерезиса получены для пор размером $a = 45$ нм = $150 ML$, $a = 140$ нм = $467 ML$, $a = 160$ нм = $533 ML$, $a = 175$ нм = $583 ML$. Температура Кюри железа составляет $T_C = 1043$ К откуда можно найти относительную температуру, соответствующую 300 К: $T = 1,29$.

Отношение обменных интегралов не может быть определено напрямую экспериментально. Расчеты из первых принципов дают большой разброс значений. Найдем отношение поверхностного обменного интеграла к объемному из косвенных экспериментальных значений. В работе [21] экспериментально показано, что при комнатных температурах намагниченность поверхностного слоя m_S превышает намагниченность в объеме системы m на величину от 10% до 14% в зависимости от ориентации поверхности относительно кристаллической решетки. В статье [89] показано, что в интервале температур $0,03T_C < T < 0,4T_C$ намагниченность с хорошей точностью описывается соотношением:

$$\frac{m(T)}{m(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (4.8)$$

Это соотношение может применено как к поверхностной, так и к объемной намагниченности. При нулевой температуре намагниченности на поверхности и в объеме совпадают, так как все спины ориентированы в одну сторону $m(0) = m_S(0)$. Отсюда получаем выражение:

$$\frac{m_S(T)}{m(T)} = \frac{1 - \left(\frac{T}{T_S}\right)^{3/2}}{1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}}. \quad (4.9)$$

Из этого уравнения может быть найдено отношение критических температур на поверхности и в объеме системы:

$$\frac{T_S}{T_C} = \frac{\frac{T}{T_C}}{\left(1 - \frac{m_S(T)}{m(T)} \left(1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}\right)\right)^{2/3}}. \quad (4.10)$$

Для модели Изинга критическая температура прямо пропорциональна обменному интегралу. Поэтому отношение обменных интегралов совпадает с отношением критических температур.

$$R = \frac{J_S}{J_0} = \frac{T_S}{T_C}. \quad (4.11)$$

Выполним подстановку максимального и минимального экспериментальных значений для определения интервала возможных значений отношения обменных интегралов. Отношению намагниченностей $m_S/m = 1,10$ соответствует отношение обменных интегралов $R = 1,68$. Если $m_S/m = 1,14$, то $R = 2,45$. Таким образом из экспериментальных данных можно сделать вывод о том, что для пленок из железа $1,68 \leq R \leq 2,45$.

Для определения реальной напряженности магнитного поля можно воспользоваться формулой:

$$h_0 = \frac{J}{\mu_B} h = \frac{k_B T_C}{4,51 \mu_B} h = 460h. \quad (4.12)$$

Рассчитанные петли гистерезиса при $R = 2,45$ для четырех размеров пор представлены на рисунке 4.20(а). Из рисунка 4.20(а) видно, что увеличение размера пор приводит к расширению петли гистерезиса и увеличению коэрцитивной силы. Аналогичные результаты, полученные в реальном эксперименте [12], представлены на рисунке 4.20(б).

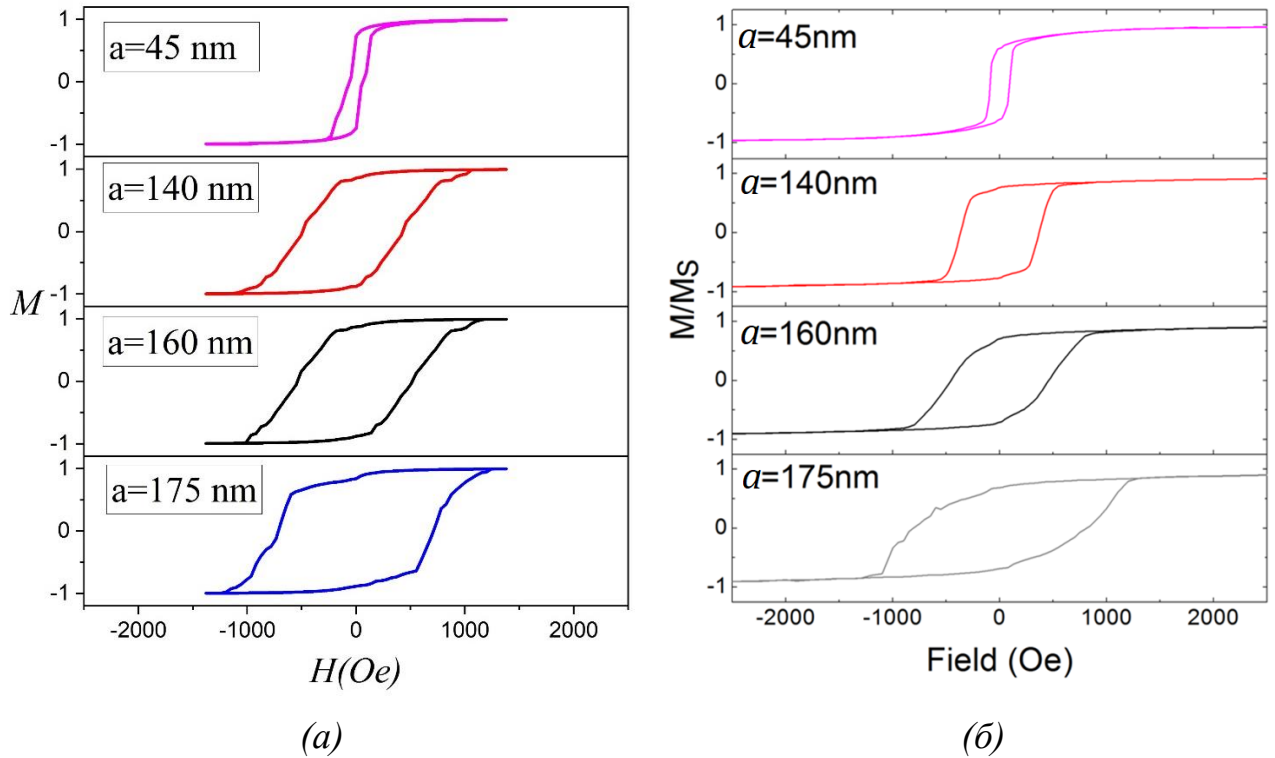


Рисунок 4.20 – Петли гистерезиса для ферромагнитной пленки железа с различным размером пор, полученные а) теоретически и б) экспериментально [12].

Сравнение рисунков 4.20(а) и 4.20(б) показывает, что результаты расчетов дают качественное совпадение с экспериментальными данными. Причем теоретические и экспериментальные значения коэрцитивной силы имеют близкие значения.

Таким образом, результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Полученные фазовые диаграммы позволяют выявлять материалы с нужными свойствами и параметрами решетки антиоточек в технологических процессах.

Поверхностный магнетизм влияет на процесс перемагничивания тонких ферромагнитных пленок. Это влияние является результатом увеличения общей энергии обменного взаимодействия спинов в материале. Увеличение обменного интеграла на поверхности вызывает рост коэрцитивной силы. Энергия перемагничивания также повышается. Решетка антиоточек в тонкой пленке может как понижать, так и повышать ее коэрцитивную силу. Влияние решетки антиоточек

зависит размера пор и поверхностной магнитной энергии. Добавление решетки антиточек в тонкой пленке повышает площадь свободной поверхности и увеличивает количество спинов на поверхности. Этот фактор оказывает два разнонаправленных влияния. Во-первых, поверхностные спины имеют меньшее количество соседей, что снижает их энергии обменного взаимодействия. В результате, снижается коэрцитивная сила пленки. Во-вторых, обменный интеграл на поверхности может превышать значение в объеме системы, что повышает энергию обменного взаимодействия. В результате, повышается коэрцитивная сила пленки. Если обменная энергия на поверхности близка по значению к обменной энергии в объеме, то доминирует первый фактор. Если поверхностная обменная энергия значительно больше значения в объеме, то доминирует второй фактор. Существует значение обменного интеграла, при котором оба фактора уравниваются друг друга. В этом случае решетка антиточек не влияет на коэрцитивность пленки. Толщина пленки также влияет на ее коэрцитивность.

Экспериментальные исследования показывают возможность проектировать пленки с заданной коэрцитивной силой путем управления ее толщиной диаметром пор и периодом решетки антиточек [38, 74, 91, 108]. Большое повышение коэрцитивной силы при нанесении решетки антиточек представляет наибольший интерес. Например, решетка антиточек в многослойной пленке CoO/Co увеличивает коэрцитивную силу до 27 раз [95]. Такое большое значение не может быть объяснено только поверхностным магнетизмом. Авторы этой работы предлагают объяснение на основе образования антивихревых структур вокруг пор. Однако этот механизм также не дает такое большое увеличение коэрцитивности. Однако эти два механизма могут объяснить полученный результат.

4.5. Выводы

По результатам данной главы для тонких ферромагнитных пленок из материалов, в которых значение обменного интеграла на поверхности отличается от объемного значения, можно сделать следующие выводы:

1. Если толщина пленки не превышает 6 моноатомных слоев, то возможно существование только двух фаз – парамагнитной и ферромагнитной. Температура фазового перехода увеличивается с ростом отношения обменных интегралов. Скорость роста температуры уменьшается с увеличением толщины пленки.

2. Для пленок, имеющих не менее 7 моноатомных слоев, возможно существование поверхностно упорядоченной объемно неупорядоченной фазы и поверхностного фазового перехода, если отношение обменных интегралов превышает некоторое критическое значение. Критическое отношение обменных интегралов убывает с ростом толщины пленки.

3. Решетка антиточек с малым размером пор уменьшает область поверхностно упорядоченной объемно неупорядоченной фазы на фазовой диаграмме, большой размер пор полностью устраняет эту фазу с фазовой диаграммы. Критический размер пор, делающий невозможным поверхностный фазовый переход, зависит от толщины пленки и растет по ступенчатому закону.

4. Коэрцитивная сила и энергия перемагничивания непрерывных тонких ферромагнитных пленок растет с увеличением отношения обменных интегралов.

5. Решетка антиточек может как снижать, так и повышать коэрцитивную силу пленки и энергию перемагничивания. Характер влияния решетки антиточек зависит от отношения обменных интегралов. Существует значение отношения обменных интегралов, при котором решетка антиточек не влияет на коэрцитивность пленки. Данное значение убывает с ростом толщины пленки.

Заключение

В заключении приведем основные результаты, полученные в диссертации.

1. Решетка наноразмерных пор, реализованная в тонких ферромагнитных пленках, изменяет температуру Кюри. Температура фазового перехода растет по нелинейному закону с увеличением периода решетки пор и стремится к значению температуры Кюри сплошной пленки. Основным фактором, влияющим на критическую температуру, является площадь свободной поверхности, которая определяет среднее координатное число для спинов системы. Зависимость температуры фазового перехода от периода решетки пор может быть аппроксимирована логарифмическим законом, если внутренняя поверхность пор не превышает пороговое значение 0,25 от общей свободной поверхности системы. Данные закономерности устойчивы к слабому смещению положения пор из узлов регулярной решетки и изменению формы пор.

Критическое поведение системы при изменении размера пор изменяется по ступенчатому закону. При малом размере пор критические индексы наноструктурированной системы совпадают со значениями непрерывной пленки. Если размеры пор превышают размеры промежутков между ними, то реализуется новый класс универсальности критического поведения.

Таким образом, выбор геометрических параметров решетки наноразмерных пор позволяет создавать пленки с заданной температурой фазовых переходов, что определяет намагниченность пленки при комнатной температуре. Общие закономерности, полученные в диссертации, могут быть применены к технологическим процессам для конкретных материалов по нескольким известным экспериментальным точкам.

2. Геометрические параметры решетки пор в тонких ферромагнитных пленках определяют коэрцитивную силу и энергию перемагничивания системы. Коэрцитивная сила нелинейно растет как с увеличением периода решетки, так и с увеличением толщины пленки. Начиная с толщины пленки $D = 12 ML$

коэрцитивная сила выходит на постоянное максимальное значение. При этом само максимальное значение уменьшается при увеличении размера пор и постоянном периоде решетки пор.

Таким образом, с помощью выбора геометрических размеров решетки пор, существует возможность снижения или повышения напряженности магнитных полей, а также энергозатрат, необходимых для перемагничивания пленок, что является определяющим фактором при проектировании устройств спинтроники.

3. Реализация решетки пор в системе, состоящих из двух ферромагнитных слоев с различной магнитной восприимчивостью (бислойных пленок), позволяет управлять магнитными свойствами системы. Температура фазового перехода бислойной пленки не зависит от толщины магнитомягкого слоя и совпадает с температурой Кюри магнитотвердого слоя. Как и для однослойной пленки, критическая температура наноструктурированной бислойной пленки нелинейно растет с увеличением периода решетки и стремится к значению непрерывной пленки. Магнитомягкий слой пленки искажает петлю гистерезиса отношении обменных интегралов $R < 0,5$. Уменьшение периода решетки пор снижает это искажение, а также коэрцитивную силу пленки. Увеличение толщины магнитомягкого слоя снижает энергию перемагничивания.

Зависимости коэрцитивной силы и энергии перемагничивания бислойных пленок от отношения обменных интегралов ее слоев имеет четко выраженный минимум, расположенный в интервале $0,6 \leq R \leq 0,7$. Минимум присутствует для пленок с любым периодом решетки пор и любой толщиной магнитомягкого слоя. Увеличение количества антиточек на единицу площади снижает коэрцитивную силу и энергию перемагничивания системы.

Таким образом, нанесение магнитомягкого слоя на наноструктурированную ферромагнитную пленку, позволяет управлять величиной магнитного поля переключения намагниченности, а также энергией перемагничивания, что существенно расширяет возможности создания тонких пленок с управляемыми магнитными свойствами.

4. Явление поверхностного магнетизма оказывает более существенное влияние на магнитные свойства ферромагнитных пленок с решеткой пор по сравнению со сплошными пленками. При толщине пленки, не превышающей 6 моноатомных слоев, возможно существование только двух фаз – парамагнитной и ферромагнитной. Температура фазового перехода увеличивается с ростом поверхностного обменного интеграла. Скорость роста температуры снижается с увеличением толщины пленки. Для пленок, имеющих не менее 7 моноатомных слоев, может наблюдаться явление поверхностного магнетизма, проявляющееся в магнитном упорядочивании тонкого поверхностного слоя при парамагнитной фазе основного объема пленки. Такое состояние возможно при условии, что отношение поверхностного обменного интеграла к объемному превышает некоторое критическое значение. Критическое отношение обменных интегралов убывает с ростом толщины пленки. Добавление решетки пор снижает разность критических температур на поверхности и в объеме системы. Существует критический размер пор, делающий невозможным поверхностный фазовый переход. Значение критического размера пор зависит от толщины пленки и растет по ступенчатому закону.

Таким образом, при изготовлении наноструктурированных пленок из ферромагнитных материалов с высокой поверхностной магнитной энергией необходимо учитывать явления, возникающие на интерфейсе между пленкой и подложкой.

5. Явление поверхностного магнетизма в ферромагнитных пленках с решеткой пор приводит к росту коэрцитивной силы, если отношение поверхностного обменного интеграла к объемному превышает критическое значение R_C , и снижению коэрцитивной силы в обратном случае. Если отношение обменных интегралов равно критическому значению, то решетка пор не влияет на коэрцитивную силу. Критическое значение обменных интегралов убывает с увеличением толщины пленки и стремится к значению $R_C = 1,55$.

Таким образом, явление поверхностного магнетизма играет существенную роль в выборе геометрических параметров решетки пор. При использовании материалов с большой поверхностной энергией для повышения коэрцитивной силы необходимо увеличивать размер пор, тогда как для материалов с низкой поверхностной магнитной энергией размер пор необходимо снижать.

В диссертационном исследовании расчеты построены на модели Изинга, так как многочисленные эксперименты показывают наличие оси легкого намагничивания в тонких наноструктурированных пленках. Однако при увеличении толщины пленки данная анизотропия становится менее выраженной, что требует использования модели Гейзенберга с различными константами анизотропии. Таким образом, развитие исследований, выполненных в диссертации, связано с переходом к другой спиновой модели и учета изменения направления перемангничивания.

Публикации автора по теме диссертации

Публикации в журналах из списка ВАК:

1. Belim, S.V. Computer Simulation of Phase Transitions in Thin Films with an Antidote Lattice. / S.V Belim, S.S. Belim, I.V. Tikhomirov, I.V. Bychkov//Coatings. – 2022. – V. 12. – P. 1526. <https://doi.org/10.3390/coatings12101526>
2. Belim, S.V. Effect of disorder on phase transitions in antidote lattice thin films: computer simulations. / S.V. Belim, S.S. Simakova, I.V. Tikhomirov // Letters on Materials. – 2023. – V.13, Is. 4. – P. 304-307.
3. Белим, С.В. Магнитные свойства бислойной пленки с решеткой антидотчек: монте-карло-моделирование / С.В. Белим, С.С. Симакова, И.В. Тихомиров // Физика металлов и металловедение. - 2024. - Т. 125. - №12. - С. 1512-1521.
4. Belim, S.V. Effect of surface magnetism on ferromagnetic films with an antidote lattice: Monte Carlo simulation. / S.V. Belim, S.S. Simakova // Letters on Materials. – 2025. – V. 15. – №. 4. – P. 230-235.
5. Belim, S.V. Influence of surface magnetism on phase transitions in thin ferromagnetic films with antidot lattice: Monte Carlo simulation. / S.V. Belim, S.S. Simakova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2026. – V. 645. – P. 173951.

Публикации в прочих изданиях:

1. Компьютерное моделирование перемагничивания тонких пленок с решеткой антидотчек. / С.С. Симакова, И.В. Тихомиров, С.В. Белим // Физика и технология перспективных материалов - 2023 : сб. тр. Междунар. конф. (г. Уфа, 2–6 окт. 2023 г.)
2. Компьютерное моделирование фазовых переходов в тонких пленках с решеткой антидотов. / С.В. Белим, С.С. Симакова, И.В. Тихомиров // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и

нелинейные явления в конденсированных средах». (г. Махачкала, 10–15 сентября 2023 г.)

3. Исследование бислойных пленок с решеткой антиточек методом компьютерного моделирования / С.С. Симакова // Материалы 62-й Международной научной студенческой конференции (г. Новосибирск, 17–23 апреля 2024 г.)

4. Моделирование магнитных свойств бислойных пленок с решеткой антиточек методом Монте-Карло / С.С. Симакова, И.В. Тихомиров, С.В. Белим / Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы: сборник трудов Открытой школы-конференции стран СНГ (г. Уфа, 30 сентября – 4 октября 2024 г.)

5. Компьютерное моделирование перемагничивания тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиточек. / С.С. Симакова, И.В. Тихомиров, С.В. Белим // Физика и технология перспективных материалов – 2025: сб. тр. Междунар. конф. (г. Уфа, 6–10 октября 2025 г.)

6. Компьютерное моделирование поверхностных фазовых переходов в ферромагнитных пленках с решеткой антиточек. / С.С. Симакова, С.В. Белим, И.В. Тихомиров // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». (г. Махачкала, 26–31 октября 2025 г.)

Список использованных источников

1. Васильев, А. Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. / А. Н. Васильев // СПб.: ПИЯФ — 1998. — 733 с.
2. Головчук, В. И. Корреляция электрических, гальваномагнитных и магнитных характеристик нанокристаллических пленок железа, полученных методом ионно-ассистированного осаждения / В. И. Головчук, Ю. А. Бумай, М. Г. Лукашевич, и др. // Физика твердого тела. — 2021. — Т. 63. — №. 12. — С. 2096-2105.
3. Денисова, Е. А. Локальная магнитная анизотропия в наноструктурированных покрытиях FeCo–C, синтезированных методами зеленой химии / Е. А. Денисова, С. В. Комогорцев, Л. А. Чеканова, и др. // Физика твердого тела. — 2022. — Т. 64. — №. 9. — С. 1196-1200.
4. Денисова, Е. А. Магнитная анизотропия наноструктурированных покрытий Fe–Ni–C, полученных методом химического осаждения / Е. А. Денисова, Л. А. Чеканова, С. В. Комогорцев, и др. // Физика твердого тела. — 2023. — Т. 65. — №. 6. — С. 888-893.
5. Калинин, Ю. Е. Магнитные и магниторезистивные свойства многослойных наноструктур (Co/CoO)₆₀ / Ю. Е. Калинин, К. С. Габриельс, В. А. Макагонов, и др. // Физика твердого тела. — 2025. — Т. 67. — №. 4. — С. 724-736.
6. Камилов, И. К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев // Успехи физических наук. — 1999. — Т. 169. №. 7. — С. 773-795.
7. Ландау, Л. Д. Статистическая физика. 3-е изд. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц — М.: Наука, 1976. — 584 с.
8. Мелех, Б. Т. Наноструктурированные магнитные пленки оксидов железа, полученные методом лазерного электродиспергирования / Б. Т. Мелех, Д. А.

- Курдюков, Д. А. Явсин, и др. // Письма в Журнал технической физики. – 2016. – Т. 42. – №. 19. – С. 62-69.
9. Муртазаев, А. К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев // Физика низких температур. – 2011. – Т. 37, № 12. – С. 1258-1268.
 10. Соболев, И.М. Численные методы Монте-Карло. / И.М. Соболев – М.: Наука. – 1973. – 312 с.
 11. Трушин, О. С. Управление магнитной анизотропией и оптическими характеристиками наноструктурированных пленок кобальта методом наклонного напыления / О. С. Трушин, И. С. Фаттахов, А. А. Попов, и др. // Физика твердого тела. – 2023. – Т. 65. – №. 6. – С. 996-1001.
 12. Belim, S. V. A study of the surface phase transition in epitaxial antiferromagnetic films by Monte Carlo simulation / S.V. Belim, E.V. Bogdanova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2024. – Vol. 599. – P. 172107.
 13. Belim, S. V. Computer Simulation of Critical Behavior of Semi-Infinite Antiferromagnetic Material / S.V. Belim, E.V. Trushnikova // Physics of Metals and Metallography. – 2018. – Vol. 119. – №. 5. – P. 441-447.
 14. Belim, S. V. Computer simulation of phase transitions in thin films with an antidote lattice / S.V. Belim, S.S. Belim, I.V. Tikhomirov, I.V. Bychkov // Coatings. – 2022. – Vol. 12. – №. 10. – P. 1526.
 15. Beron, F. An effective method to probe local magnetostatic properties in a nanometric FePd antidot array / F. Beron, K. R. Pirota, V. Vega, [et. al.] // New Journal of Physics. – 2011. – Vol. 13. №. 1. – P. 013035.
 16. Béron, F. Nanometer scale hard/soft bilayer magnetic antidots / F. Béron, A. Kaidatzis, M. F. Velo, [et. al.] // Nanoscale research letters. – 2016. – Vol. 11. – P. 1-11.
 17. Bielajew, A. F. Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport / A. F. Bielajew // The University of Michigan. – 2001. – Vol. 1.

18. Binder, K. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization / K. Binder // *Physical Review Letters*. – 1981. – Vol. 47. – №. 9. – P. 693.
19. Binder, K. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions / K. Binder // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. – 1981. – Vol. 43. – P. 119-140.
20. Blote, H. W. J. Ising universality in three dimensions: a Monte Carlo study / H. W. J. Blote, E. Luijten, J. R. Heringa // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. – 1995. – Vol. 28, №. 22. – P. 6289.
21. Brookes N. B. et al. Magnetic surface states on Fe (001) // *Physical Review B*. – 1990. – T. 41. – №. 4. – C. 2643.
22. Campagna, M. Surface magnetism: Recent progress and opportunities / M. Campagna // *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*. – 1985. – Vol. 3. – №. 3. – P. 1491-1495.
23. Cara, E. Directed self-assembly of polystyrene nanospheres by direct laser-writing lithography / E. Cara, F. Ferrarese Lupi, M. Fretto, [et. al.] // *Nanomaterials*. – 2020. – Vol. 10. – №. 2. – P. 280.
24. Castán-Guerrero, C. Coercivity Dependence on Periodicity of Co and Py Antidot Arrays / C. Castán-Guerrero, J. Bartolomé, F. Bartolomé, [et. al.] // *Journal of the Korean Physical Society* – 2013 – Vol.62 – P. 1521-1524.
25. Chen, M. K. Structure of epitaxial graphene on Ir(111) / M. K. Chen, H. Rokni, W. Lu, X. G. Liang // *Microsyst. Nanoeng.* – Vol.3. – 2017. – P. 17053.
26. Choudhury, S. Controlled Evolution of Spin Waves in Unconventional Defective Honeycomb Antidot Lattices / S. Choudhury, S. Barman, Y. Otani, A. Barman // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2019. – Vol. 489. – P. 165408.
27. Chowdhury, N. Study of magnetization relaxation in Co thin films prepared by substrate rotation / N. Chowdhury, S. Mallick, S. Mallik, S. Bedanta // *Thin Solid Films*. – 2016. – Vol. 616. – P. 328-334.
28. Deshpande, N.G. Tailoring of magnetic properties of patterned cobalt antidots by simple manipulation of lattice symmetry / N.G. Deshpande, M.S. Seo, X.R. Jin, [et. al.] // *Applied Physics Letters*. – 2010. – Vol. 96. №. 12. – P. 122503

29. Diehl, H. W. Massive field-theory approach to surface critical behavior in three-dimensional systems / H.W. Diehl, M. Shpot // Nuclear Physics B. – 1998. – Vol. 528. – №. 3. – P. 595-647.
30. Dieny, B. Perpendicular magnetic anisotropy at transition metal/oxide interfaces and applications / B. Dieny, M. Chshiev // Reviews of Modern Physics. – 2017. – Vol. 89. – №. 2. – P. 025008.
31. Elyacoubi A. S. E., Surface effects on the magnetocaloric properties of perovskites ferromagnetic thin films: a Monte Carlo study / A. S. E. Elyacoubi, R. Masrour, A. Jabar // Applied Surface Science. – 2018. – Vol. 459. – P. 537-543.
32. Fang, H. Multipurpose nanoporous alumina–carbon nanowall bi-dimensional nano-hybrid platform via catalyzed and catalyst-free plasma CVD / H. Fang, I. Levchenko, T. van der Laan, [et. al] // Carbon. – Vol.78. – 2014. – P. 627.
33. Ferdinand, A. E. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice / A. E. Ferdinand, M. E. Fisher // Physical Review. – 1969. – T. 185. – №. 2. – C. 832.
34. Foulkes, W. M. C. Quantum Monte Carlo simulations of solids/ W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, G. Rajagopal // Reviews of Modern Physics. – 2001. – Vol. 73. №. 1. – P. 33.
35. Fox, D. S. Nanopatterning and Electrical Tuning of MoS₂ Layers with a Subnanometer Helium Ion Beam / D. S. Fox, Y. B. Zhou, P. Maguire, [et. al.] // Nano Lett. - Vol.15. - 2015. - P. 5207.
36. Giurdanella, S. Morphology and magnetic properties of sputtered Co₈₀Cr₂₀ thin film antidot patterns obtained by Electron Beam Lithography / S. Giurdanella, E. Celasco, A. Chiolerio, [et. al.] // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2010. – Vol. 200. №. 7. – P. 072034.
37. Golonzka, O. MRAM as embedded non-volatile memory solution for 22FFL FinFET technology / O. Golonzka, J. G. Alzate, U. Arslan, [et. al.] // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – IEEE, 2018. – P. 18.1. 1-18.1. 4.

38. Gong, W. J. Effect of antiferromagnetic layer thickness on exchange bias, training effect, and magnetotransport properties in ferromagnetic/antiferromagnetic antidot arrays / W.J. Gong, W. Liu, J.N. Feng, [et. al.] // Journal of Applied Physics. – 2014. – Vol. 115. – №. 13.
39. Gradmann, U. Surface magnetism / U. Gradmann //Journal of magnetism and magnetic materials. – 1991. – Vol. 100. – №. 1-3. – P. 481-496.
40. Gräfe, J. Coercivity scaling in antidot lattices in Fe, Ni, and NiFe thin films / J. Gräfe, G. Schütz, E. J. Goering // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2016. – Vol. 419. – P. 517-520.
41. Gräfe, J. Geometric control of the magnetization reversal in antidot lattices with perpendicular magnetic anisotropy / J. Gräfe, M. Weigand, N. Träger, [et. al.] // Physical Review B. – 2016. – Vol. 93. №. 10. – P. 104421.
42. Gräfe, J. Ptychographic imaging and micromagnetic modeling of thermal melting of nanoscale magnetic domains in antidot lattices / J. Gräfe, M. Skripnik, G. Dieterle, [et. al.] //AIP Advances. – 2020. – Vol. 10. – №. 12.
43. Haering, F. Geometry-induced spin-ice structures prepared by self-organization on the nanoscale / F. Haering, U. Wiedwald, T. Häberle [et. al.] // Nanotechnology – 2013 – V.24 – P. 055305.
44. Harris, A. B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models / A. B. Harris //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1974. – Vol. 7. №. 9. – P. 1671.
45. He, J. et al. Effect of Ta Interlayers on Texture and Magnetic Properties of FeSi Films with Micrometer Thickness / J. He, Z. Zhang, Z. Bao, [et. al.] // Materials. – 2022. – Vol. 15. – №. 19. – C. 6789.
46. He, S. Helium-ion-beam nanofabrication: extreme processes and applications / S. He, R. Tian, W. Wu, [et. al.] // International Journal of Extreme Manufacturing. – 2020. – Vol. 3. – №. 1. – P. 012001.
47. Heyderman, L. J. X-ray photoemission electron microscopy investigation of magnetic thin film antidot arrays / L. J. Heyderman, F. Nolting, C. Quitmann // Applied physics letters. – 2003. – Vol. 83. №. 9. – P. 1797-1799.

48. Hu, X. K. Classification of super domains and super domain walls in permalloy antidot lattices / X. K. Hu, S. Sievers, A. Müller, [et. al.] // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 84. №. 2. – P. 024404.
49. Huang, R. Phase transitions of antiferromagnetic Ising spins on the zigzag surface of an asymmetrical Husimi lattice / R. Huang, P. D. Gujrati // *Royal Society open science*. – 2019. – Vol. 6. №. 3. – P. 181500.
50. Jang, Y. H. Morphology-dependent multi-step ferromagnetic reversal processes in Co thin films on crescent-shaped antidot arrays / Y. H. Jang, J. H. Cho // *Journal of Applied Physics* – 2014 – Vol.11. – P. 063903.
51. Kaidatzis, A. Nanopatterned hard/soft bilayer magnetic antidot arrays with long-range periodicity / A. Kaidatzis, R. P. del Real, R. Alvaro, [et. al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2020. – Vol. 498. – P. 166142.
52. Kamzin, A. S. Surface and volume phase states of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ crystals in the vicinity of the Néel point / A.S. Kamzin, R.G. Glyantsev // *Physics of the Solid State*. – 2003. – Vol. 45. – №. 12. – P. 2309-2312.
53. Kent, A. D. A new spin on magnetic memories / A. D. Kent, D. C. Worledge // *Nature nanotechnology*. – 2015. – Vol. 10.№. 3. – P. 187-191.
54. Korzhavyi, P. A. Electronic structure and effective chemical and magnetic exchange interactions in bcc Fe-Cr alloys / P.A. Korzhavyi, A.V. Ruban, J. Odqvist, [et. al.] // *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*. – 2009. – Vol. 79. – №. 5. – P. 054202.
55. Krupinski, M. Influence of angular orientation, shape, and arrangement of antidots on magnetic reversal in thin films with perpendicular magnetic anisotropy / M. Krupinski, P. Sobieszcyk // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2021. – Vol. 518. – P. 167448.
56. Landau, D. P. Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet / D.P. Landau, K. Binder // *Physical Review B*. – 1978. – Vol. 17. – №. 5. – P. 2328.

57. Lemme, M. C. Graphene nanopores toward DNA sequencing: a review of experimental aspects / M. C. Lemme, D. C. Bell, J. R. Williams [et.al.] // ACS Nano. - Vol.3. - 2009. - P 2674.
58. Liang, X. G. Formation of Bandgap and Subbands in Graphene Nanomeshes with Sub-10 nm Ribbon Width Fabricated via Nanoimprint Lithography / X. G. Liang, Y. S. Jung, S. W. Wu, [et. al.] // Nano Lett. – Vol.10. – 2010. – P. 2454.
59. Lundow, P. H. The Ising model for the bcc, fcc and diamond lattices: A comparison / P. H. Lundow, K. Markström, A. Rosengren //Philosophical Magazine. – 2009. – Vol. 89. №. 22-24. – P. 2009-2042.
60. Mallick, S. Effect of substrate rotation on domain structure and magnetic relaxation in magnetic antidot lattice arrays / S. Mallik, S. Mallik, S. Bedanta// Journal of Applied Physics. – 2015. – Vol. 118. №. 8. – 083904
61. Mallick, S. Relaxation dynamics in magnetic antidot lattice arrays of Co/Pt with perpendicular anisotropy / S. Mallick, S. S. Mishra, S. Bedanta // Scientific reports. – 2018. – Vol. 8. №. 1. – P. 11648.
62. Mallick, S. Size and shape dependence study of magnetization reversal in magnetic antidot lattice arrays / S. Mallik, S. Bedanta // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2015. – Vol. 382. – P. 158-164.
63. Manzin, A. Micromagnetic modelling of the anisotropy properties of permalloy antidot arrays with hexagonal symmetry / A. Manzin, O. Bottauscio // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2012. – Vol. 45. №. 9. – P. 095001.
64. Marchenko, A. I. Skyrmion-like bubbles and stripes in a thin ferromagnetic film with lattice of antidots / A. I. Marchenko, V. N. Krivoruchko // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2015. – Vol. 377. – P. 153-158.
65. Martens, S. Local modes and two magnon scattering in ordered permalloy antidot arrays / S. Martens, O. Albrecht, K. Nielsch, D. Görlitz // Journal of Applied Physics. – 2009. – Vol. 105. №. 7. – P. 07C113

66. Martyanov, O. N. Ferromagnetic resonance study of thin film antidot arrays: Experiment and micromagnetic simulations / O. N. Martyanov, V. F. Yudanov, R. N. Lee, [et. al.] // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 75. №. 17. – P. 174429.
67. Maximenko, A. Antidot arrays of FePd: modification of magnetic properties by successive annealing / A. Maximenko, J. Fedotova, M. Marszałek, [et. al.] // *Physics, chemistry and applications of nanostructures: Proceedings of international conference nanomeeting* – 2015. – P. 350-353.
68. Merazzo, K. J. Dependence of magnetization process on thickness of Permalloy antidot arrays / K. J. Merazzo, R. P. del Real; A. Asenjo, M. Vázquez // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – Vol. 109. №. 7. – P. 07B906
69. Merazzo, K. J. Geometry-dependent magnetization reversal mechanism in ordered Py antidot arrays / K. J. Merazzo, D. C. Leitaó, E. Jimenez, [et. al.] // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2011. – Vol. 44. №. 50. – P. 505001.
70. Michea, S. Tailoring the magnetic properties of cobalt antidot arrays by varying the pore size and degree of disorder / S. Michea, J.L. Palma, R. Lavín, [et. al.] // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2014. – Vol. 47. №. 33. – P. 335001.
71. Mills, D. L. Surface effects in magnetic crystals near the ordering temperature / D. L. Mills // *Physical Review B*. – 1971. – Vol. 3. – №. 11. – P. 3887.
72. Mitrofanov, A. Exchange bias without directional anisotropy in permalloy/CoO bilayers / A. Mitrofanov, G. Chen, A. Kozhanov, S. Urazhdin // *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 104. – №. 14. – P. 144413.
73. Montroll, E. W. Correlations and spontaneous magnetization of the two-dimensional Ising model / E. W. Montroll, R. B. Potts, J. C. Ward // *Journal of Mathematical Physics*. – 1963. – Vol. 4. №. 2. – P. 308-322.
74. Morales, R. Ultradense arrays of sub-100 nm Co/CoO nanodisks for spintronics applications / R. Morales, A.N. Flores, N.M. Vargas, [et. al.] // *ACS Applied Nano Materials*. – 2020. – Vol. 3. – №. 5. – P. 4037-4044.
75. Nakaharai, S. Etching of Graphene Devices with a Helium Ion Beam / S. Nakaharai, T. Iijima, S. Ogawa, [et. al.] // *ACS Nano*. - Vol.7. - 2013. - P. 5694.

76. Ng, A. M. H. Emerging flexible and wearable physical sensing platforms for healthcare and biomedical applications / A. M. H. Ng, Kenry, C. T. Lim, [et. al.] // Biosens. Bioelectron. – Vol.65. – 2015. – P. 265.
77. Ng, A. M. H. Patterning of graphene with tunable size and shape for microelectrode array devices / A. M. H. Ng, Y. Wang, W. C. Lee, [et. al.] // Carbon. – Vol.67. – 2014. – P. 390.
78. Nitsche, F. Tetragonal to orthorhombic phase transition of GdFeAsO studied by single-crystal X-ray diffraction / F. Nitsche, T. Doert, M. Ruck // Solid state sciences. – 2013. – Vol. 19. – P. 162-166.
79. Ostrikov, K. Growth and photoluminescence of oriented MoSe₂ nanosheets produced by hot filament CVD / K. Ostrikov, T. van der Laan, S. Kumar, [et. al.] // Carbon. – Vol.78. – 2014. – P. 627.
80. Pajda, M. Ab initio calculations of exchange interactions, spin-wave stiffness constants, and Curie temperatures of Fe, Co, and Ni / M. Pajda, J. Kudrnovsky, I. Turek, V. Drchal Bruno // Physical Review B. – 2001. – Vol. 64. – №. 17. – P. 174402.
81. Palma, J. L. Magnetic properties of Fe₃O₄ antidot arrays synthesized by AFIR: Atomic layer deposition, focused ion beam and thermal reduction/ J. L. Palma, A. Pereira, R. Álvaro, [et. al.] // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2018. – Vol. 9. №. 1. – P. 1728-1734.
82. Paz, E. Scaling of the coercivity with the geometrical parameters in epitaxial Fe antidot arrays / E. Paz, F. Cebollada, F. J. Palomares, [et. al.] // J. Appl. Phys. – 2012 – Vol.111. – P. 073908
83. Perzanowski, M. Exchange bias in the [CoO/Co/Pd] 10 antidot large area arrays / M. Perzanowski, M. Krupinski, A. Zarzycki, [et. al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2017. – Vol. 9. – №. 38. – P. 33250-33256.
84. Perzanowski, M. Influence of superparamagnetism on exchange anisotropy at CoO/[Co/Pd] interfaces / M. Perzanowski, M. Marszalek, A. Zarzycki, [et. al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2016. – Vol. 8. – №. 41. – P. 28159-28165.

85. Pirota, K. R. Coercive field behavior of permalloy antidot arrays based on self-assembled template fabrication / K. R. Pirota, P. Prieto, A. M. J. Neto, [et. al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2008. – Vol. 320. №. 14. – P. e235-e238.
86. Potthoff, M. Surface magnetism studied within the mean-field approximation of the Hubbard model / M. Potthoff, W. Nolting // *Physical Review B*. – 1995. – Vol. 52. – №. 21. – P. 15341.
87. Prida, V.M. Template Assisted Deposition of Ferromagnetic Nanostructures: from Antidot Thin Films to Multisegmented Nanowires / V.M. Prida, M. Salaheldeen, G. Pfitzer, [et. al.] // *Acta Physica Polonica A*. – 2017 – Vol.131 – P. 822-827.
88. Prudnikov, V. V. Critical dynamics of disordered two-dimensional Ising systems: a Monte Carlo study / V. V. Prudnikov, O. N. Markov // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. – 1995. – Vol. 28. №. 6. – P. 1549.
89. Rado G. T., Walker J. C. Clarification of the different roles of surface anisotropy for thermal spin waves and FMR modes // *Journal of Applied Physics*. – 1982. – T. 53. – №. 11. – C. 8055-8057.
90. Rahman, M. T. Co/Pt perpendicular antidot arrays with engineered feature size and magnetic properties fabricated on anodic aluminum oxide templates / M. T. Rahman, N. N. Shams, C. H. Lai, [et. al.] // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. №. 1. – P. 014418.
91. Rahman, M. T. Enhanced exchange bias in sub-50-nm IrMn/CoFe nanostructure / M.T. Rahman, N.N. Shams, D.S. Wang, C.-H. Lai // *Applied Physics Letters*. – 2009. – Vol. 94. – №. 8.
92. Rodríguez-Suárez, R. L. Ferromagnetic resonance investigation in permalloy magnetic antidot arrays on alumina nanoporous membranes / R. L. Rodríguez-Suárez, J. L. Palma, E. O. Burgos, [et. al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2014. – Vol. 350. – P. 88-93.

93. Saavedra, E. Dynamic and static properties of stadium-shaped antidot arrays / E. Saavedra, R. M. Corona, N. Vidal-Silva, [et. al.] // *Scientific Reports*. – 2020. – Vol. 10. №. 1. – P. 20024.
94. Salaheldeen, M. Dependence of the magnetization process on the thickness of Fe₇₀Pd₃₀ nanostructured thin film / M. Salaheldeen, A.M. Abu-Dief, L. Martínez-Goyeneche, [et. al.] // *Materials*. – 2020. – Vol. 13. – №. 24. – P. 5788.
95. Salaheldeen, M. Enhancement of exchange bias and perpendicular magnetic anisotropy in CoO/Co multilayer thin films by tuning the alumina template nanohole size / M. Salaheldeen, A. Nafady, A.M. Abu-Dief, [et. al.] // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol. 12. – №. 15. – P. 2544.
96. Salaheldeen, M. Enhancement the perpendicular magnetic anisotropy of nanopatterned hard/soft bilayer magnetic antidot arrays for spintronic application / M. Salaheldeen, L. Martínez-Goyeneche, P. Álvarez-Alonso, A. Fernández // *Nanotechnology*. – 2020. – Vol. 31. – №. 48. – P. 485708.
97. Salaheldeen, M. Influence of nanoholes array geometrical parameters on magnetic properties of Dy–Fe antidot thin films / M. Salaheldeen, V. Vega, R. Caballero-Flores, [et. al.] // *Nanotechnology*. – 2019. – Vol. 30. №. 45. – P. 455703.
98. Salaheldeen, M. Tailoring of Perpendicular Magnetic Anisotropy in Dy₁₃Fe₈₇ Thin Films with Hexagonal Antidot Lattice Nanostructure / M. Salaheldeen, V. Vega, A. Ibabe, [et. al.] // *Nanomaterials* – 2018 – Vol. 8 – P. 227.
99. Salaheldeen, M. Anomalous in-plane coercivity behaviour in hexagonal arrangements of ferromagnetic antidot thin films / M. Salaheldeen, V. Vega, A. Fernández, V. M. Prida // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2019 – Vol. 491 – P. 165572.
100. Schultz, T. D. Two-dimensional Ising model as a soluble problem of many fermions / T. D. Schultz, D. C. Mattis, E. H. Lieb // *Reviews of Modern Physics*. – 1964. – Vol. 36. №. 3. – P. 856.
101. Sedrpooshan, M. Single-Step Production and Self-Assembly of Magnetic Nanostructures for Magneto-Responsive Soft Films / M. Sedrpooshan, P. Maltoni, D.

- Peddis, [et. al.] // ACS applied materials & interfaces. – 2025. – Vol. 17. – №. 14. – P. 21682-21690.
102. Shams, N. N. Defect mediated tuning of exchange bias in IrMn/CoFe nanostructure / N.N. Shams, M.T. Rahman, C.-H. Lai // Journal of Applied Physics. – 2009. – Vol. 105. – №. 7.
103. Singh, S. P. Revisiting 2D lattice based spin flip-flop Ising model: Magnetic properties of a thin film and its temperature dependence / S. P. Singh // European Journal of Physics Education. – 2017. – Vol. 5. №. 3. – P. 8-19.
104. Song, Y. J. Demonstration of highly manufacturable STT-MRAM embedded in 28nm logic / Y. J. Song, J. H. Lee, S. H. Han, [et. al.] // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – IEEE, 2018. – P. 18.2. 1-18.2. 4.
105. Sonsin, A. F. Computational analysis of 3D Ising model using metropolis algorithms / A. F. Sonsin, M. R. Cortes, D. R. Nunes, [et. al.] // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – Vol. 630. №. 1. – P. 012057.
106. Staaks, D. Nanoimprint lithography guiding templates for advanced magnetic media fabrication / D. Staaks, Y. Hsu, K.Y. Lee, [et. al.] // Journal of Vacuum Science & Technology B. – 2024. – Vol. 42. – №. 1.
107. Tacchi, S. Angular dependence of magnetic normal modes in NiFe antidot lattices with different lattice symmetry / S. Tacchi, M. Madami, G. Gubbiotti, // IEEE transactions on magnetics. – 2010. – Vol. 46. №. 6. – P. 1440-1443.
108. Tripathy, D. Probing the exchange bias in Co/CoO nanoscale antidot arrays using anisotropic magnetoresistance / D. Tripathy, A.O. Adeyeye // Physical Review B— Condensed Matter and Materials Physics. – 2009. – Vol. 79. – №. 6. – P. 064413.
109. Vázquez de Parga, A. L. Periodically rippled graphene: growth and spatially resolved electronic structure / A. L. V. de Parga, F. Calleja, B. Borca, [et. al.] // Phys. Rev. Lett. – Vol.100. – 2008. – P. 56807.
110. Vieu, C. High resolution magnetic patterning using focused ion beam irradiation / C. Vieu, J. Gierak, H. Launois, [et. al.] // Microelectronic engineering. – 2000. – Vol. 53. – №. 1-4. – P. 191-194.

111. Vo, T. H. Nitrogen-doping induced self-assembly of graphene nanoribbon-based two-dimensional and three-dimensional metamaterials / T. H. Vo, U. G. E. Perera, M. Shekhiriev, [et. al.] // *Nano Lett.* - Vol.15. - 2015. - P. 5770.
112. Waldman, M. New combining rules for rare gas van der Waals parameters / M. Waldman, A.T. Hagler // *Journal of computational chemistry.* – 1993. – Vol. 14. – №. 9. – P. 1077-1084.
113. Wang, C. C. Magnetic antidot nanostructures: effect of lattice geometry. / C. C. Wang, A. O. Adeyeye, N. Singh // *Nanotechnology.* – 2006. – Vol. 17. №. 6. – P. 1629.
114. Wang, Z. D. Magnetic Phase Transition in Strained Two-Dimensional CrSeTe Monolayer / Z. D. Wang, Q. Huang, P. Chen, [et. al.] // *Sci. Rep.* – Vol.6. – 2016. – P. 38394.
115. White, R. M. Quantum theory of magnetism. / R. M. White // B. Bayne– Berlin : Springer-Verlag, 1983. – Vol. 1. – 361 p.
116. Wiedwald, U. Magnetic switching of nanoscale antidot lattices. / U. Wiedwald, J. Gräfe, K. M. Lebecki, [et. al.] // *Beilstein Journal of Nanotechnology.* – 2016. – Vol. 7, 1. – P. 733-750.
117. Wolf, S. A. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future / S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman // *Science* – 2001. – Vol. 294. – P. 1488-1495
118. Wolff, U. Collective Monte Carlo updating for spin systems / U. Wolff // *Physical Review Letters.* – 1989. – Vol. 62. №. 4. – P. 361.
119. Yildirim, O. Ion-irradiation-induced cobalt/cobalt oxide heterostructures: printing 3D interfaces / O.Yildirim, D. Hilliard, S.S.P.K. Arekapudi, [et. al.] // *ACS Applied Materials & Interfaces.* – 2020. – Vol. 12. – №. 8. – P. 9858-9864.
120. Yuan, P. The magnetic and structural properties of BiFeO_{3-x} (0 < x < 3) thin films with controllable oxygen vacancy / P. Yuan, D. Li, L. Wu, L. Shi // *Ceramics International.* – 2019. – Vol. 45. – №. 9. – P. 12594-12598.
121. Zhang, C. Wafer-Scale Highly Ordered Anodic Aluminum Oxide by Soft Nanoimprinting Lithography for Optoelectronics Light Management / C. Zhang, W.

- Li, D. Yu, [et. al.] // *Advanced Materials Interfaces*. – 2017. – Vol. 4. – №. 5. – P. 1601116.
122. Zhang, Min *Electromagnetic Functions of Patterned 2D Materials for Micro–Nano Devices Covering GHz, THz, and Optical Frequency* / Min Zhang, Xi-Xi Wang, Wen-Qiang Cao [et. al.] // *Advanced Optical Materials*. – 2019. – Vol. 7., №. 19. – P. 1900689.