

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

На правах рукописи



Богданова Елизавета Владимировна

**ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННЫХ
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ И АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЁНОК МЕТОДОМ
МОНТЕ-КАРЛО**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Омск-2023

Работа выполнена на кафедре «Физика» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет»

Научный руководитель: **Белим Сергей Викторович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры «Физика» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет»

Официальные оппоненты: **Вахитов Роберт Миннисламович**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»

Кузьмин Дмитрий Александрович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики и электроники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики им. Х.И. Амирханова» Дагестанского федерального исследовательского центра РАН

Защита состоится 26 января 2024 в 12.00 на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129, конференц зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Челябинского государственного университета. Электронная версия автореферата доступна по адресу: <http://www.csu.ru>

Автореферат разослан «___» _____ г.

Учёный секретарь
диссертационного совета 24.2.431.01,
доктор физико-математических наук, доцент



Загребин М.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Явления поверхностного магнетизма связаны с отличием температуры фазового перехода на поверхности системы от соответствующей температуры в основном объеме. Поверхностный магнетизм наблюдался экспериментально для различных материалов, таких как Fe_3BO_6 , $FeBO_3$, Fe_2O_3 [1,2,3], $PdFe$ [4], Tb [5], Gd [6]. Причем температура поверхностного перехода может быть, как выше объемной, так и ниже. Так для Gd поверхностная температура превышает объемную на 15 К, а для $PdFe$ ниже объемной на 2 К. Явления поверхностного магнетизма могут быть исследованы теоретически с помощью спиновых моделей, имеющих свободную поверхность. Исследование полуограниченных спиновых систем в рамках теории среднего поля показало, что причиной поверхностного магнетизма является отличие энергии межспинового взаимодействия на поверхности системы от аналогичной энергии в объеме системы. Как показывают расчеты из первых принципов и реальные эксперименты, энергия межспинового взаимодействия для свободной поверхности может быть, как больше, так и меньше объемной, что приводит к разности температур переходов. В зависимости от соотношения энергий межспинового взаимодействия на фазовой диаграмме системы может присутствовать четыре фазы, отвечающих наличию или отсутствию упорядочивания спинов на поверхности и в объеме системы. Также на фазовой диаграмме могут присутствовать мультикритические точки, которые имеют трикритический или тетракритический характер.

Описание полуограниченных систем в рамках теоретико-полевого подхода позволило определить значения критических индексов, характерных для всех линий фазовых переходов, присутствующих на фазовой диаграмме системы. Однако теоретико-полевой подход носит феноменологический характер и не позволяет определять вид фазовой диаграммы исходя из микроскопических параметров, таких как значение обменных интегралов.

Компьютерное моделирование полуограниченных ферромагнитных систем и тонких ферромагнитных пленок показало, что возможные фазы вещества и типы фазовых переходов определяются соотношением трех обменных интегралов: объемного, поверхностного и взаимодействия поверхностных спинов с первым подповерхностным слоем. Аналогичные результаты для антиферромагнитных систем получены не были. При этом из результатов реальных экспериментов вытекает, что эффекты поверхностного магнетизма для антиферромагнитных систем должны быть более выраженными, так как отсутствует магнитное поле, создаваемое упорядоченными спинами объема системы.

В связи с чем актуальной является задача компьютерного моделирования полуограниченных антиферромагнитных систем и тонких антиферромагнитных пленок и исследование поверхностных фазовых переходов, происходящих в них.

Цель диссертационной работы – исследование фазовых переходов в ограниченных антиферромагнитных системах методом компьютерного моделирования.

1. Осуществлено исследование фазовых переходов в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга со свободной поверхностью методом компьютерного моделирования.

2. Изучены характеристики фазовых переходов в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга со свободной поверхностью при различных значениях поверхностной магнитной энергии.

3. Осуществлено исследование фазовых переходов в тонких антиферромагнитных пленках в рамках модели Изинга методом компьютерного моделирования.

4. Изучены характеристики фазовых переходов в тонких антиферромагнитных пленках, описываемых моделью Изинга, при различных значениях поверхностной магнитной энергии.

Методы исследования

Исследование проводилось с помощью метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса и теории конечномерного скейлинга. Для описания магнитных свойств системы использовалась модель Изинга. Для определения температуры и типа фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Критические индексы вычислялись на основе скейлинговых соотношений.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Температура поверхностного фазового перехода в полуограниченных антиферромагнитных системах зависит от отношения обменных интегралов R на поверхности и в основном объеме системы. При различных значениях R температура поверхностного фазового перехода может быть как выше, так и ниже температуры Нееля для объема системы. Пересечение линий объемного и поверхностного фазовых переходов происходит в тетракритической точке при $R_0 = 1,38$. Критические индексы поверхностного фазового перехода приближаются к значениям двумерных систем с ростом отношения обменных интегралов.

2. В полуограниченных антиферромагнитных системах при отношении обменных интегралов $R < 1$ наблюдается поверхностно-неупорядоченная объемно-упорядоченная фаза. При $R < 1$ поверхностный фазовый переход обладает признаками фазового перехода третьего рода.

3. Для тонких антиферромагнитных пленок с толщиной не более 6 моноатомных слоев поверхностный фазовый переход не наблюдается. Для таких пленок увеличение поверхностного обменного интеграла приводит к росту общей температуры фазового перехода системы. Критические индексы тонких антиферромагнитных пленок совпадают со значениями двумерной модели Изинга.

4. Для тонких пленок толщиной более 6 моноатомных слоев может наблюдаться поверхностный фазовый переход при отношении обменных интегралов на поверхности и в объеме системы превышающем некоторое пороговое значение, зависящее от толщины пленки. Температура поверхностного фазового перехода нелинейно зависит от отношения обменных интегралов. Основной объем пленки переходит в упорядоченную фазу в результате экстраординарного фазового перехода, который является размытым фазовым переходом второго рода.

5. Линии поверхностного, объемного и экстраординарного фазового перехода пересекаются в трикритической точке специального фазового перехода. Положение точки специального фазового перехода на фазовой диаграмме зависит от толщины пленки и отношения обменных интегралов.

Научная новизна

1. Методом компьютерного моделирования исследованы фазовые переходы в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга при различных отношениях обменных интегралов на поверхности и в объеме системы. Новизна состоит в рассмотрении значений отношения интегралов меньше единицы, которое может приводить к существованию поверхностно-неупорядоченной объемно-упорядоченной фазы и тетракритической точки на фазовой диаграмме системы.

2. Методом компьютерного моделирования исследован переход из поверхностно-неупорядоченной объемно-упорядоченной фазы в упорядоченную фазу. Новизна состоит в рассмотрении вторых производных от параметра порядка и выявлении признаков фазового перехода третьего рода.

3. Методом компьютерного моделирования исследованы условия возникновения поверхностного фазового перехода в тонких антиферромагнитных пленках. Новизна состоит в определении минимальной толщины антиферромагнитной пленки, необходимой для реализации поверхностного фазового перехода. Показано, что экстраординарный фазовый переход в тонких антиферромагнитных пленках является размытым фазовым переходом второго рода.

4. Методом компьютерного моделирования исследован специальный фазовый переход в тонких антиферромагнитных пленках. Новизна состоит в определении

зависимости температуры и условий появления трикритической точки специального фазового перехода на фазовой диаграмме системы.

Практическая и научная значимость результатов

Научная и практическая значимость результатов состоит в теоретическом исследовании поверхностных фазовых переходов в антиферромагнитных системах, определении режимов критического поведения в зависимости от относительной величины поверхностной энергии.

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» (Махачкала, 2017), V Международная научная конференция «Математическое и компьютерное моделирование» (Омск, 2017), XI Международная IEEE научно-техническая конференция «Динамика систем, механизмов и машин» (Омск, 2017), Workshop on Data, Modeling and Security (Омск, 2017), Workshop on Data, Modeling and Security (Омск, 2018), XII Международная IEEE научно-техническая конференция «Динамика систем, механизмов и машин» (Омск, 2018), X Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 100-летию первого декана математического факультета БашГУ Зигандара Иргалеевича Биглова (Уфа, 2018), VII Международная научно-техническая конференция «Проблемы машиноведения», (Омск, 2023), Международная конференция «Физика и технология перспективных материалов-2023» (Уфа, 2023).

Степень достоверности результатов работы

Все полученные результаты обоснованы адекватностью применяемых методов и подтверждаются сравнением с результатами реальных экспериментов.

Публикации

Материалы диссертации опубликованы в 12 изданиях, из них 4 статьи в журналах из списка, рекомендованного ВАК, 3 статьи, индексируемых в международной базе Scopus, 5 публикаций в материалах конференций и 1 свидетельство о регистрации программ.

Структура и объем диссертации

Диссертация содержит: введение, 3 главы, заключение и библиографический список. Общий объем диссертации 121 страница, библиографический список содержит 171 источник.

Личный вклад автора

Все публикации выполнены в соавторстве с научным руководителем. Автор диссертации принимал участие во всех этапах подготовки публикаций: постановке задачи, компьютерном моделировании, обработке результатов компьютерного эксперимента и обсуждении результатов.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении описана актуальность работы, поставлена цель и выдвинуты задачи, аргументирована научная новизна и практическая значимость работы, а также сформулированы положения и результаты, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации работы.

В первой главе приведен обзор литературы по методам компьютерного моделирования критического поведения спиновых систем. Рассмотрены основы метода Монте-Карло и алгоритма Метрополиса, модель Изинга и её сопоставление с реальными антиферромагнитными материалами. Рассматриваются свойства тонких пленок, проведен обзор теоретических и экспериментальных исследований таких плёнок.

Во второй главе исследуется критическое поведение полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга методом компьютерного моделирования при различных значениях поверхностной энергии.

Гамильтониан полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга в относительных единицах может быть записан в следующем виде:

$$\frac{H}{J_B} = \sum_B S_i S_j + R \sum_S S_i S_j + R \sum_{SB} S_i S_j + h \sum S_i \quad (1)$$

где S_i – значения спина в i -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$), R – отношение обменных интегралов $R = J_S/J_B$. Константа обменного взаимодействия в объеме системы – J_B , на поверхности системы – J_S , $h = \frac{\mu_B h_0}{J_B}$, h_0 – напряженность внешнего магнитного поля.

В данной системе возможны 4 фазы: SD/BD – неупорядоченная фаза, SO/BD – поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза, SO/BO – поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза, SD/BO – поверхностно-неупорядоченная объемно-упорядоченная фаза. Между фазами могут существовать следующие виды фазовых переходов [7]: 1) SD/BD → SO/BD – поверхностный (surface) фазовый переход, 2) SO/BD → SO/BO – экстраординарный (extraordinary) фазовый переход, 3) SD/BD → SO/BO – обычный

(ordinary) или объемный фазовый переход, 4) SD/BD \rightarrow SD/BO – подповерхностный (undersurface) фазовый переход.

Компьютерное моделирование осуществлялось для трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с кубической решеткой, имеющей линейные размеры $L \times L \times 2L$, методом Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса. Плоскость свободной поверхности задавалась уравнением $z = 0$, система располагалась в полупространстве $z \geq 0$. Использовались периодические граничные условия. Для спинов, расположенных в плоскости $z = 2L$, соседними считались спины в плоскости $z = L$. Моделируемые системы имели линейные размеры $20 \leq L \leq 48$ с шагом $\Delta L = 4$. Количество шагов Монте-Карло на спин 6×10^5 . Отношение обменных интегралов $0.5 \leq R \leq 2.0$ с шагом $\Delta R = 0.1$. Для определения температуры фазового перехода использовалась теория конечноразмерного скейлинга.

Для исследования антиферромагнитного упорядочивания использовались два параметра порядка – объемная шахматная намагниченность m и шахматная намагниченность спинов, расположенных на свободной поверхности m_s . Критическая температура перехода определялась с помощью объемных U и поверхностных U_s кумулянтов Биндера четвертого порядка по положению точки пересечения кумулянтов для систем с различными размерами L .

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad U_s = 1 - \frac{\langle m_s^4 \rangle}{3\langle m_s^2 \rangle^2} \quad (2)$$

Для наблюдения за поведением восприимчивости в объеме системы и на ее поверхности использовались флуктуационные соотношения для магнитной восприимчивости в объеме χ и на поверхности χ_s . Также были определены критические индексы.

Были получены зависимости температуры Нееля T_N объемного перехода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние и температуры фазового перехода в поверхностном слое T_s .

На основе результатов компьютерного эксперимента была построена фазовая диаграмма системы (рисунок 1).

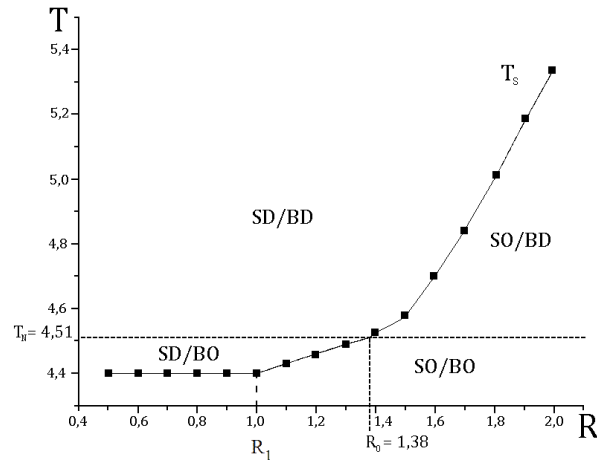


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы. Пунктирная линия – зависимость температуры объемного фазового перехода T_N от отношения обменных интегралов R , сплошная линия – зависимость температуры поверхностного фазового перехода T_S от R .

Показано, что температура объемного фазового перехода не зависит от R и является постоянной, совпадающей с температурой Нееля для неограниченной трехмерной антиферромагнитной модели Изинга $T_N = 4.51$. Температура поверхностного фазового перехода T_S растет с увеличением R . Это можно объяснить ростом энергии теплового движения, необходимой для переворота одного спина, с увеличением R . Нелинейность зависимости T_S от R объясняется взаимодействием поверхностного слоя со слоем спинов, следующим за поверхностным. Линии объемного и поверхностного фазовых переходов пересекаются в одной точке $R_0 = 1.38$, образуя тетракритическую точку, система может находиться в четырех фазах: SD/BD, SO/BO, SO/BD и SD/BO.

Полученная фазовая диаграмма для трехмерной полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга существенно отличается от аналогичной диаграммы для ферромагнитной модели Изинга. Для антиферромагнитной системы совпадение температур объемного и поверхностного переходов наблюдается всего в одной точке. Поведение температуры поверхностного перехода T_S существенно различается при удалении от тетракритической точки по оси R в разные стороны. При $R > R_0$ наблюдается монотонный рост T_S при увеличении R . При $R < R_0$ T_S при уменьшении R сначала монотонно убывает, но, начиная с $R = R_1$, стабилизируется на значении $T_S = 4.40$ и далее остается неизменной. Это различие в поведении поверхностной критической температуры объясняется влиянием основного объема системы. Если остужать систему из парамагнитного состояния, то при $R > R_0$ сначала произойдет упорядочение поверхностного слоя, тогда как образец в целом будет находиться в парамагнитном состоянии. В этой ситуации объем системы будет оказывать слабое влияние на наличие порядка на поверхности. В случае остывания системы с $R < R_0$ упорядочение сначала

происходит в объеме системы. При этом объемные домены начинают выходить на поверхность и существенно влиять на ориентацию поверхностных спинов. Причем, чем меньше R , тем влияние соседних поверхностных спинов друг на друга меньше, а влияние объемных доменов больше. В результате, при $R < R_1$ объемные домены начинают играть доминирующую роль в возникновении порядка на поверхности системы.

Объемные критические индексы для полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга совпадают с соответствующими индексами неограниченной модели при всех R в силу слабого влияния одного поверхностного спинового слоя на поведение термодинамических функций бесконечного количества слоев. Значения поверхностных критических индексов отличается как от объемных критических индексов (что объясняется двумерностью поверхностного слоя), так и от критических индексов двумерной антиферромагнитной модели Изинга (можно объяснить влиянием основной системы на процессы на поверхности).

В третьей главе исследуются фазовые переходы в тонких пленках, описываемых антиферромагнитной моделью Изинга, методом компьютерного моделирования при различных значениях поверхностной энергии.

В рассматриваемой модели тонкая пленка представляет собой набор атомных слоев с кубической кристаллической решеткой. Пленка описывается моделью Изинга, спин каждого атома имеет значение $+1/2$ или $-1/2$. Константа обменного взаимодействия в объеме системы $-J_0$, на поверхности системы $-J_s$, отношение констант обменного взаимодействия $R = J_s/J_0$. Поверхностный фазовый переход возможен в случае $J_s > J_0$, $R \geq 1$. Гамильтониан модели в относительных единицах:

$$\frac{H}{J_0} = \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + R \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum S_i \quad (3)$$

При компьютерном моделировании тонкая пленка располагалась параллельно плоскости OXY . Поверхности пленки имели уравнения $z = 0$ и $z = D - 1$. D – толщина пленки, определяемая количеством моноатомных слоев. Система имела размеры $L \times L \times D$. L – количество атомов вдоль осей OX и OY . Для изучения свойств бесконечной пленки на систему накладывались периодические граничные условия: для спинов в плоскости $x = 0$ соседними являются спины в плоскости $x = L$; для спинов в плоскости $y = 0$ – спины в плоскости $y = L$. Компьютерный эксперимент проводился для антиферромагнитных пленок толщиной $4 \leq D \leq 16$ слоев с шагом $\Delta D = 2$. Линейные размеры системы изменялись $16 \leq L \leq 64$ с шагом $\Delta L = 16$. Отношение констант обменного

взаимодействия $1.0 \leq R \leq 3.0$ с шагом $\Delta R = 0.1$. Для исследования возможности появления поверхностного антиферромагнетизма тонкие пленки рассматривались как три взаимодействующие подсистемы: две подсистемы – свободные поверхности (моноатомные слои, ограничивающие пленку), третья подсистема – множество спинов в объеме пленки без двух крайних слоев. Первая и вторая подсистемы расположены симметрично и демонстрируют одинаковое поведение при изменении температуры системы.

Для всех значений параметров вычислялась температура Нееля T_N антиферромагнитного фазового перехода в основном объеме системы и температура поверхностного фазового перехода T_s . После этого строились фазовые диаграммы пленок различной толщины D при различных параметрах R . Фазовые диаграммы существенно зависят от толщины пленки. Эта зависимость связана с относительным размером основного объема пленки и поверхностного слоя.

Для описания процессов упорядочивания спинов в объеме системы вводился антиферромагнитный параметр порядка m_a – разность намагниченностей двух подрешеток (четной (even) и нечетной (odd)), сдвинутых относительно друг друга на постоянную решетки вдоль осей OX, OY, OZ . Для характеристики поверхностного упорядочивания спинов вводился аналогичный антиферромагнитный поверхностный параметр порядка m_s

$$m_a = \frac{\left(\sum_{\text{even}} S_i - \sum_{\text{odd}} S_i \right)}{L^2(D-2)}, \quad m_s = \frac{\left(\sum_{\text{even}_S} S_i - \sum_{\text{odd}_S} S_i \right)}{L^2} \quad (4)$$

Для описания фазовых переходов в тонких пленках было использовано несколько термодинамических функций, которые также могут быть использованы для определения температуры фазового перехода.

Магнитная восприимчивость подрешеток системы для основного объема χ_a и поверхности χ_s :

$$\chi_a = \frac{\partial m_a}{\partial h} = L^2(D-2) \left(\langle m_a^2 \rangle - \langle m_a \rangle^2 \right) / T, \quad \chi_s = \frac{\partial m_s}{\partial h} = L^2 \left(\langle m_s^2 \rangle - \langle m_s \rangle^2 \right) / T \quad (5)$$

Теплоемкость основного объема C и свободной поверхности C_s :

$$C = \frac{\partial E_a}{\partial T} = L^2(D-2) \left(\langle E_a^2 \rangle - \langle E_a \rangle^2 \right) / T, \quad C_s = \frac{\partial E_s}{\partial T} = L^2 \left(\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2 \right) / T \quad (6)$$

Кумулянты Биндера четвертого порядка для параметров порядка и для энергии системы:

$$U_a = 1 - \frac{\langle m_a^4 \rangle}{3 \langle m_a^2 \rangle^2}, \quad U_s = 1 - \frac{\langle m_s^4 \rangle}{3 \langle m_s^2 \rangle^2}, \quad V_a = 1 - \frac{\langle E_a^4 \rangle}{3 \langle E_a^2 \rangle^2}, \quad V_s = 1 - \frac{\langle E_s^4 \rangle}{3 \langle E_s^2 \rangle^2}. \quad (7)$$

Для пленок толщиной $D = 4$ размеры основного объема совпадают с размерами поверхностного слоя, для $D = 6$ размеры основного объема превышают в два раза размеры поверхностного слоя. Для таких пленок температура для поверхностного фазового перехода T_s совпадает с температурой Нееля в основном объеме T_N , поэтому можно говорить об единой температуре фазового перехода T_N . Аналогичные результаты были получены и из исследования других термодинамических функций. Были построены графики зависимости температуры фазового перехода T_N от отношения констант обменного взаимодействия R (рисунок 2).

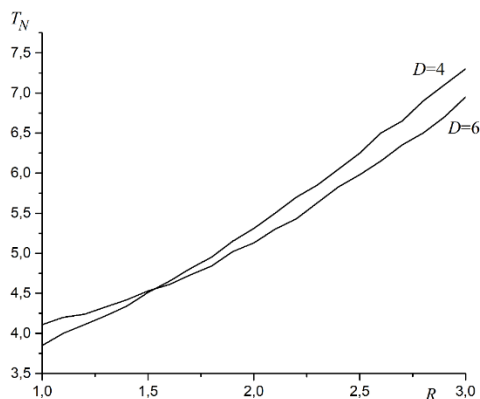


Рис.2. Зависимость температуры антиферромагнитного фазового перехода T_N от отношения констант обменного взаимодействия R для пленок толщиной $D = 4$ и $D = 6$.

При значениях $R < 1.5$ температура фазового перехода в пленке толщиной $D = 6$ выше, чем в пленке толщиной $D = 4$. Эта закономерность согласуется с известным фактом о том, что в двумерных системах температура фазового перехода ниже, чем в трехмерных. Пленки занимают промежуточное положение между трехмерными и двумерными системами. Температура фазового перехода в пленке растет с увеличением толщины пленки. Для обеих пленок температура растет с увеличением поверхностной константы обменного взаимодействия. Рост температуры обусловлен увеличением энергии взаимодействия между спинами. Для переворота одного спина требуется большая энергия теплового движения. Из графика также видно, что температура Нееля для пленки толщиной $D = 6$ растет медленнее, чем для пленок толщиной $D = 4$. При $R > 1.5$ температура Нееля для пленок толщиной $D = 6$ становится меньше, чем для $D = 4$. Это обусловлено тем, что скорость роста обратно пропорциональна толщине пленки.

В пленках толщиной $D \geq 8$ существует критическое значение отношения констант обменного взаимодействия R_c , выше и ниже которого поведение системы различно. При $R \leq R_c$ температуры поверхностного и объемного фазовых переходов совпадают ($T_s =$

T_N). Если $R > R_c$, то антиферромагнитное упорядочивание на поверхности пленки происходит при более высокой температуре, чем в объеме пленки ($T_s > T_N$). При понижении температуры системы сначала происходит антиферромагнитное упорядочивание в моноатомном поверхностном слое, а потом, при более низкой температуре, упорядочиваются спины в объеме пленки. То есть, при $R > R_c$ в системе происходит два фазовых перехода: при температуре T_s – поверхностный фазовый переход, при температуре T_N – экстраординарный фазовый переход. При $R \leq R_c$ в системе наблюдается только один обычный фазовый переход при температуре T_N . Температура поверхностного фазового перехода растет с увеличением параметра R , то есть поверхностной константы обменного взаимодействия. Таким образом на фазовой диаграмме системы присутствует три линии фазовых переходов второго рода и три фазы системы (рисунок 3). Эти три линии фазовых переходов пересекаются в одной точке (трикритическая точка), фазовый переход в которой – специальный. Положение точки специального фазового перехода на фазовой диаграмме определяется значением R_c , положение R_c зависит от толщины пленки D .

Расчеты показали, что для всех значений отношения констант обменного взаимодействия R и всех значений толщины пленки D экстраординарный фазовый переход является фазовым переходом второго рода.

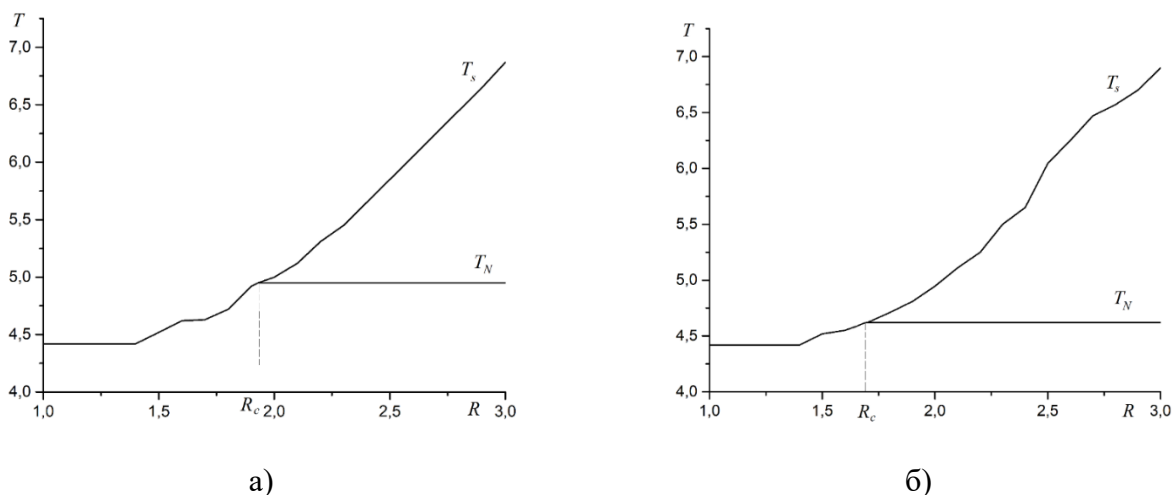
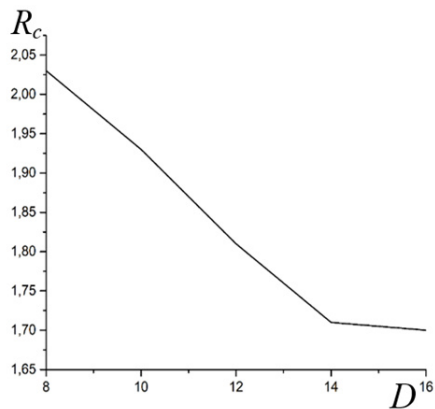


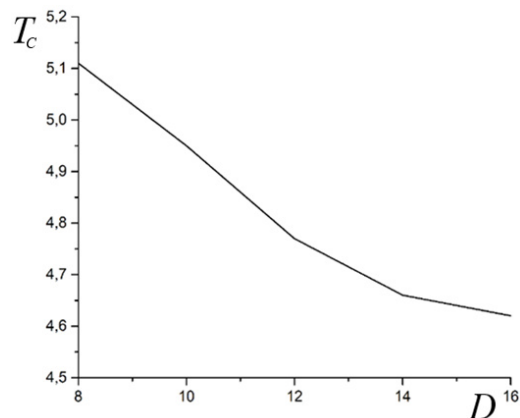
Рис.3. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной: а) $D = 10$, б) $D = 16$.

График зависимости критического значения отношения констант обменного взаимодействия R_c от толщины пленки D показан на рисунке 4.

В промежутке толщин пленок от $D = 8$ до $D = 14$ значение R_c убывает линейно с ростом толщины пленки. При $D > 14$ скорость убывания R_c снижается и асимптотически стремится к значению $R_0 = 1,38$ характерному для полубесконечных систем.



а)



б)

Рис. 4. Графики зависимости критического значения отношения констант обменного взаимодействия R_c от толщины пленки D (а); температуры специального фазового перехода T_c от толщины пленки D (б).

Для температуры специального фазового перехода T_c наблюдается такая же зависимость от толщины пленки, как и для критического значения R_c . Температура специального перехода убывает с ростом толщины пленки. Причем скорость убывания высокая в промежутке от $D = 8$ до $D = 14$ и снижается при $D > 14$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Компьютерное моделирование антиферромагнитных полуограниченных систем в рамках модели Изинга показало возможность существования в системе четырех фаз, связанных с упорядочиванием спинов на поверхности и в основном объеме системы. При этом:

1.1. Поверхностный фазовый переход в полуограниченных антиферромагнитных системах носит более выраженный характер по сравнению с ферромагнитными системами. При этом точка пересечения линий объемного и поверхностного фазовых переходов носит тетракритический характер.

1.2. На фазовой диаграмме полуограниченных антиферромагнитных систем может присутствовать поверхностно неупорядоченная объемно упорядоченная фаза. Данная фаза наблюдается при значениях обменного интеграла на поверхности ниже значения объемного аналога. Эта фаза может существовать в очень узком интервале температур.

1.3. При фазовом переходе из поверхностно-неупорядоченной объемно-упорядоченной фазы в полностью упорядоченную фазу не наблюдается флуктуаций термодинамических функций, характерных, для фазового перехода второго рода. При этом скачкообразное изменение и сингулярное поведение наблюдается для термодинамических

функций, представляющих собой вторые производные от энергии и намагниченности, что позволяет говорить о фазовом переходе близком к третьему роду.

1.4. Критические индексы поверхностного фазового перехода зависят от отношения обменных интегралов на поверхности и в объеме системы. С ростом отношения обменных интегралов критические индексы поверхностного фазового перехода стремятся к значениям, характерным для двумерной модели.

2. Поверхностное упорядочивание в эпитаксиальных антиферромагнитных пленках зависит от толщины пленки. При этом:

2.1. В сверхтонких антиферромагнитных пленках не происходит поверхностный фазовый переход. Упорядочивание спинов на поверхности и в основном объеме системы происходит при одной и той же температуре. При этом температура фазового перехода растет с увеличением поверхностной энергии обменного взаимодействия спинов. При увеличении толщины пленки скорость роста температуры Нееля уменьшается.

2.2. Если толщина пленок превышает некоторый предел, то поверхностный фазовый переход может происходить при температурах выше температуры обычного фазового перехода. На фазовой диаграмме системы присутствует три фазы, связанные с упорядочиванием спинов на поверхности и в основном объеме системы. Разделение объемного и поверхностного фазовых переходов происходит, если отношение поверхностная энергия обменного взаимодействия превышает некоторое пороговое значение.

2.3. После перехода поверхностного слоя в антиферромагнитную фазу основной объем системы упорядочивается при более низкой температуре в результате экстраординарного фазового перехода. Экстраординарный переход является фазовым переходом второго рода. Упорядоченные спины поверхности играют роль внешнего поля, сопряженного антиферромагнитному параметру порядка основной системы и приводят к размыванию фазового перехода.

2.4. Для эпитаксиальных антиферромагнитных пленок с толщиной более 6 моноатомных слоев на фазовой диаграмме присутствует трикритическая точка специального фазового перехода, в которой пересекается три линии фазовых переходов второго рода. Положение точки определяется критическим значением отношения констант обменного взаимодействия. Температура специального фазового перехода убывает по нелинейному закону с ростом толщины пленки и стремится к значению, характерному для полуограниченных систем.

Публикации автора по теме диссертации

Публикации в журналах из списка ВАК:

1. Белим С.В. Исследование критического поведения полуограниченных антиферромагнетиков методами компьютерного моделирования / Белим С.В., Трушникова Е.В. // Физика металлов и металловедение. – 2018. – Т.119, № 5. – С. 465–471.

2. Белим С.В. Исследование поверхностного фазового перехода полуограниченных антиферромагнитных систем методом компьютерного моделирования / Белим С.В., Трушникова Е.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2018. – № 9. – С. 102–105.

3. Белим С.В. Исследование критического поведения антиферромагнитных тонких пленок методом компьютерного моделирования / Белим С.В., Трушникова Е.В. // Письма о материалах. – 2018. – № 4. – С. 440–442.

4. Белим С.В. Исследование экстраординарного фазового перехода в тонких антиферромагнитных пленках: компьютерное моделирование / Белим С.В., Богданова Е.В. // Челябинский физико-математический журнал. – 2023. – Т. 8, № 3. – С. 410–420.

Публикации в изданиях, индексируемых в базе Scopus:

1. Trushnikova E.V. Computer Simulation of Semi-Infinite Antiferromagnetics Ising Models Critical Behavior / Trushnikova E.V., Belim S.V. // Proceedings of the Workshop on Data, Modeling and Security (DMS 2017). CEUR Workshop Proceedings. – 2017. – V.1965. [Электронный ресурс] URL:<http://ceur-ws.org/Vol-1965/paper2.pdf>.

2. Belim S.V. Computer Modeling of Phase Transitions of Semibounded Antiferromagnets / Belim S.V., Trushnikova E.V. // Journal of Physics: Conf. Series. – 2018. – V.944. – P. 012011(1-7).

3. Belim S.V. Computer Simulation of Surface Phase Transitions of Antiferromagnetic Films / Belim S.V., Trushnikova E.V. // Journal of Physics: Conf. Series. – 2019. – V. 1210. – P. 012011 (1-7).

Публикации в прочих изданиях:

1. Белим С.В. Исследование поверхностного фазового перехода в антиферромагнитной модели Изинга методом Монте-Карло. / Белим С.В., Трушникова Е.В. // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные эффекты в конденсированных средах», 2017, С.43–46.

2. Трушникова Е.В. Исследование поверхностного фазового перехода в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга / Трушникова Е.В. // Математическое и компьютерное моделирование: сборник материалов V Международной

научной конференции, посвященной памяти Р.Л. Долганова – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017, С. 89–91.

3. Трушников Е.В. Исследование фазовых переходов в тонких пленках, описываемых антиферромагнитной моделью Изинга / Трушников Е.В. // Сборник тезисов докладов X Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 100-летию первого декана математического факультета БашГУ Зигандара Иргалеевича Биглова (г. Уфа, 16 – 20 октября 2018 г.), С. 14.

4. Богданова Е.В. Исследование поверхностного фазового перехода в антиферромагнитных пленках с помощью компьютерного моделирования / Богданова Е.В., Белим С.В. // Материалы VII Международной научно-технической конференции «Проблемы машиноведения» (г. Омск, 16 – 17 мая 2023 года), С. 52–57.

5. Богданова Е.В. Компьютерное моделирование экстраординарного фазового перехода в тонких антиферромагнитных пленках / Богданова Е.В., Белим С.В. // Сборник трудов Международной конференции «Физика и технология перспективных материалов-2023» (г. Уфа, 2 – 6 октября 2023 г.), С. 49–51.

Список литературы

1. Камзин, А.С. Исследования магнитных свойств поверхности в области температуры Нееля антиферромагнетика Fe_3VO_6 методом мессбауэровской спектроскопии. / А.С. Камзин, Л.А. Григорьев // Письма в ЖЭТФ. – 1993. – Т. 57, № 9. – С. 538–542.

2. Камзин, А.С. Исследования свойств поверхностных слоев и объема кристалла методами мессбауэровской спектроскопии/ А.С. Камзин, Л.А. Григорьев// Письма в ЖТФ. – 1990. – Т. 16, № 16. – С. 38–41.

3. Gota, S. Magnetic properties of $\text{Fe}_2\text{O}_3(0001)$ thin layers studied by soft x-ray linear dichroism/ S. Gota, M. Gautier-Soyer, M. Sacchi // Physical Review B. – 2001. – Vol. 64.– P. 224407-1–224407-5.

4. McGrath, R.D. Differences in critical behavior observed near T_c with Mössbauer scattering and transmission geometries/ R.D. McGrath, R.M. Mirzababayev, J.C. Walker // Physics Letters A. – 1978. – Vol. 67, № 2. – P. 149–150.

5. Rau, C. Ferromagnetic order and critical behavior at surfaces of ultrathin epitaxial films / C. Rau // Applied Physics A. – 1989. – Vol. 49. – P. 579–587.

6. Rau, C. Surface magnetization of Gd at the bulk Curie temperature/ C. Rau, M. Robert // Physical Review Letters. – 1987. – Vol. 58. – P. 2714–2717.

7. Lubensky, T.C. Critical phenomena in semi-infinite systems. II. Mean-field theory / T.C. Lubensky, H. Rubin // Physical Review B (Condensed Matter). – 1975. – Vol. 12. – P. 3885-3901.