

На правах рукописи

Мальцев Иван Валерьевич

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

Специальность 1.3.8.
Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет».

Научный руководитель: **Бычков Игорь Валерьевич**,
доктор физ.-мат. наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», профессор кафедры радиофизики и электроники

Официальные оппоненты: **Шарафуллин Ильдус Фанисович**,
доктор физ.-мат. наук, доцент,
ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»,
заведующий лабораторией дизайна новых материалов

Космачёв Олег Александрович,
доктор физ.-мат. наук, доцент,
ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского»,
профессор кафедры теоретической физики

Ведущая организация: «Институт физики им. Х.И. Амирханова»
– обособленное подразделение ФГБУН ДФИЦ РАН

Защита состоится 7 июня 2024 г. в 12:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001 г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Челябинского государственного университета и на сайте <https://www.csu.ru>.

Автореферат разослан «___» _____ 2024 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.431.01,
доктор физ.-мат. наук, доцент

Загребин М.А.

Общая характеристика работы

В настоящее время большой интерес у исследователей вызывают электронные и электродинамические свойства наноструктур и метаповерхностей на основе одномерных (1D) и двумерных (2D) материалов. Это вызвано приближением к пределу своих возможностей электронных компонентов на основе традиционных материалов, таких как кремний или германий. В отличие от трёхмерных магнетиков, в которых критическое поведение наблюдается в узком температурном диапазоне вблизи точки Кюри, в 1D-магнетиках возникает сильный близкодействующий порядок при приближении к нулевой температуре. Это делает 1D-магнетики интересными с точки зрения изучения критических явлений в широком диапазоне температур [1]. Развитие технологий позволяет создавать различные одномерные и квазиодномерные магнитные наноструктуры, которые могут применяться, например, для поглощения микроволнового излучения [2].

Двумерные материалы обладают широким спектром электронных свойств, начиная от диэлектрика - гексагонального нитрида бора (h -BN), полупроводников - черного фосфора и дихалькогенидов переходных металлов, таких как дисульфид молибдена (MoS_2) и диселенид вольфрама (WSe_2), до полуметаллического графена.

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

На корреляционные свойства большинства 1D и 2D-материалов существенное влияние оказывает подложка [3]. Влияние подложки становится значительным и при формировании тонких плёнок на немагнитной подложке. Различие кристаллических структур подложки и плёнки может приводить к изменению геометрической структуры плёнки, что может сказываться на термодинамических и магнитных свойствах плёнки [4]. В частности, в системе может наблюдаться смещение точки Кюри.

Влияние на магнитные свойства и температуру магнитных фазовых переходов может оказывать и внешнее электрическое поле посредством магнитоэлектрического (МЭ) эффекта. Спонтанный МЭ эффект может проявляться в однофазных кристаллах, в которых наблюдается сосуществование двух типов упорядочения: магнитного и электрического. Гигантский МЭ эффект обычно наблюдается в системах, состоящих из тонкой ферромагнитной (ФМ) пленки, размещенной

на сегнетоэлектрической (СЭ) подложке. Под действием электрического поля происходит деформация СЭ подложки, вслед за ней ФМ пленка тоже начинает деформироваться.

Большинство исследований в данной сфере сосредоточены на конкретных материалах. Общий же подход к описанию подобных явлений является недостаточно разработанным, что обосновывает актуальность темы диссертационной работы.

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

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

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

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Температурные зависимости поляризации 1D-мультиферроика во внешнем магнитном поле с учётом потенциала подложки. Введение периодического потенциала подложки разрушает магнитную структуру, уменьшает поляризацию 1D-мультиферроика и сдвигает температуру магнитного фазового перехода.
2. Зависимости намагниченности и температуры фазового перехода от внешнего электрического поля. Деформация подложки под воздействием внешнего электрического поля приводит к уменьшению температуры Кюри. При слабых полях полученные зависимости имеют линейный вид, что соответствует

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

Научная новизна:

1. Впервые получены температурные зависимости поляризации 1D-мультиферроика при различных параметрах потенциала Френкеля-Конторовой.
2. Впервые получена зависимость смещения температуры фазового перехода в 2D-магнетике на СЭ подложке под действием внешнего электрического поля, и проведено её сравнение с аналитическим выражением, полученным с помощью теории среднего поля.
3. Впервые получены зависимости температуры Кюри и критических индексов 2D-магнетика от параметров периодического потенциала подложки, и проведено сравнение полученных зависимостей с выражением для температуры фазового перехода в линейном приближении.
4. Впервые проведена оценка влияния немагнитной подложки и внешнего магнитного поля на скирмионную структуру 2D-магнетика.

Практическая значимость. Полученные результаты являются новыми и вносят вклад в понимание особенностей влияния подложки на магнитные свойства 1D и 2D-материалов, что может быть применено при создании низкоразмерных материалов для устройств спинтроники,

стрейтронике и магноники. Полученные зависимости температуры фазового перехода и критических индексов 2D-магнетика от параметров потенциала подложки могут быть полезными при изготовлении двумерных материалов, сохраняющих спонтанную намагниченность при более высоких температурах.

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

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

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

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

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

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

Содержание работы

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

В **первой главе** рассмотрены используемые методы и теории, с помощью которых проведено диссертационное исследование. Рассмотрены классические и кластерные методы Монте-Карло (МК) применительно к наиболее популярным моделям магнетиков (модель Изинга, XY и Гейзенберга). Описано исследование критических явлений методом Монте-Карло, теория конечно-размерного масштабирования, учитывающая эффекты конечных размеров системы. Дана оценка погрешности метода Монте-Карло. В главе дано описание модели Френкеля-Конторовой, которая применялась для моделирования влияния подложки на свойства 1D и 2D-магнетиков.

Вторая глава посвящена исследованию поведения дипольной подсистемы в одномерном мультиферроике на подложке. Дано описание модельного квазиодномерного мультиферроика $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$, а также краткий обзор литературы по исследованию данного вещества и соединений на его основе.

При Монте-Карло моделировании была использована модель Изинга для цепочки спинов с конкурирующими взаимодействиями ближайших и следующих соседей (1D ANNNI модель). Гамильтониан используемой модели:

$$H = H_{FM} + H_{AFM} + H_M + H_E + H_{el} + H_{FK}; \quad (1)$$

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

$$- \sum_{[i,j]}^{Co} J_{AFM_{Co}}(r_{i,j}) S_i S_j; \quad H_M = -hg\mu_B \sum_i S_i; \quad H_E = -E \sum_i qd_i;$$

$$H_{el} = \frac{1}{2}k \sum_i d_i^2; H_{FK} = -\alpha_{FK} \sum_i \cos\left(\frac{2\pi(i + d_i)}{b_{FK}}\right),$$

где H_{FM} и H_{AFM} - гамильтонианы конкурирующих ФМ и АФМ взаимодействий, J_{FM}, J_{AFM} - обменные интегралы ФМ и АФМ взаимодействия, $r_{i,j}$ - расстояние между i -ым и j -ым ионами под влиянием обменной стрикции, d_i - смещение i -го иона, нормированное на r_0 . Для простоты предполагаем, что движутся только ионы Со, поэтому J_{AFM} не зависит от $r_{i,j}$ для Mn. H_M и H_E представляют собой энергии магнитного и электрического полей соответственно, h - внешнее магнитное поле, g - фактор Ланде, μ_B - магнетон Бора, E - внешнее электрическое поле, q - заряд движущихся ионов. H_{el} - упругая энергия, k - коэффициент упругости, H_{FK} описывает периодический потенциал подложки, α_{FK} - амплитуда потенциала, b_{FK} - период потенциала.

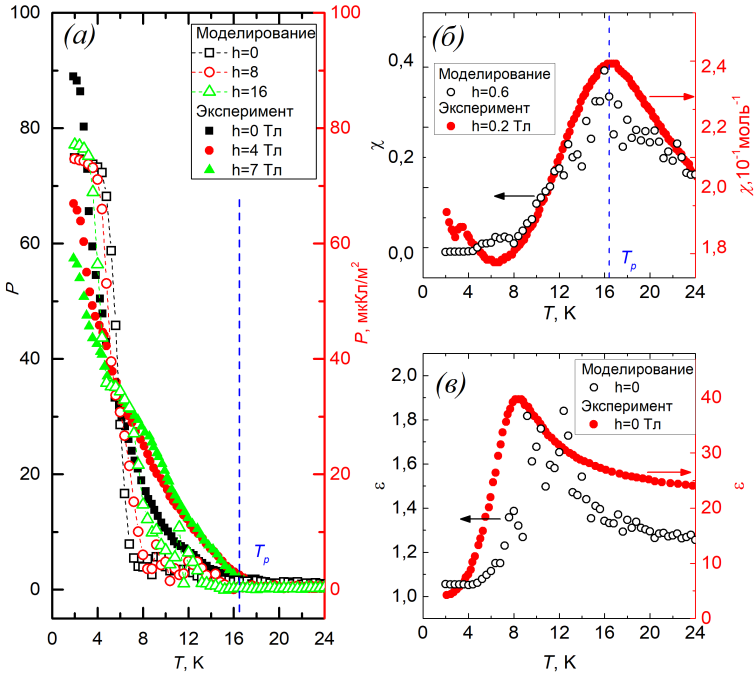


Рис. 1 — Температурные зависимости поляризации (а), магнитной восприимчивости (б) и диэлектрической проницаемости (в), полученные при моделировании и из эксперимента для $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$ ($x = 0.96$) [5].

МК моделирование проводилось на одномерной цепочке Изинга, длиной $L = 4000$ с периодическими граничными условиями. Переход в новое состояние осуществляется согласно алгоритму Метрополиса. Постоянная Больцмана принята за единицу, поэтому температура измеряется в единицах энергии. Результаты моделирования без учета периодического потенциала подложки приведены на рисунке 1. Эти результаты качественно согласуются с экспериментом для $\text{Ca}_3\text{Co}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_6$ ($x = 0.96$) [5].

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

Детальное изучение одномерной цепочки спинов позволило подтвердить предположение о том, что сегнетоэлектричество в кристалле $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ обусловлено формированием спиновой структуры *up-up-down-down* ($\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$).

Влияние периодического потенциала подложки на макроскопическую поляризацию показано на рисунке 2. Увеличение амплитуды потенциала приводит к уменьшению электрической поляризации, но изменение периода потенциала почти не влияет на величину поляризации.

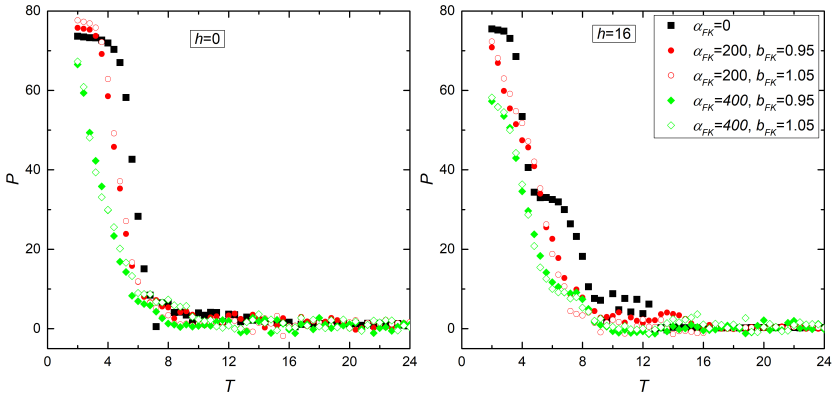


Рис. 2 — Температурные зависимости поляризации с учётом влияния периодического потенциала подложки.

В третьей главе исследовано поведение 2D ФМ плёнки на СЭ подложке с периодической структурой под влиянием электрического поля. Моделирование поведения плёнки проведено с помощью метода МК и кластерного алгоритма Вольфа. Влияние СЭ подложки на ФМ плёнку моделировалось введением периодического потенциала Френкеля-Конторовой в гамильтониан системы:

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

где x_n, y_n координаты на поверхности подложки, a - постоянная решётки плёнки (в недеформированном состоянии), b_x и b_y периоды потенциала подложки вдоль осей x и y соответственно (нормированные на a), k - упругая постоянная. В недеформированном состоянии подложка имеет квадратную решётку ($b_x = b_y = b$). Внешнее электрическое поле деформирует подложку. Предположим, что деформация подложки ϵ линейно зависит от напряженности электрического поля E (при малых деформациях). Происходит изменение периода потенциала вдоль вектора напряженности поля (предположим, вдоль оси x , т.е. $b_x = \epsilon b$). Связь между напряженностью электрического поля и относительной деформации подложки запишем в виде:

$$1 - \epsilon = \gamma E, \quad (3)$$

где γ - сегнетоэлектрическая постоянная, характеризующая конкретное вещество. Для упрощения было принято $|\gamma| = 1$. Значения $\gamma > 0$ приводит к сжатию подложки и $E = 1 - \epsilon$, $\gamma < 0$ приводит к растяжению подложки и $E = \epsilon - 1$.

С помощью компьютерного моделирования были исследованы системы с линейными размерами L от 18 до 204. Расчет равновесного расположения атомов плёнки занимает 100 000 МК шагов. Затем рассчитывается эволюция магнитной системы: первые 100 000 МК шагов отбрасываются, а термодинамические характеристики рассчитываются в течении следующих 50 000 МК шагов. Расчет температуры Кюри выполняется с помощью кумулянтов Биндера четвертого порядка для различных размеров L .

Моделирование показало, что деформация подложки приводит к уменьшению температуры фазового перехода в ФМ плёнке (рисунок 3 (а)). Такое поведение зависимости температуры Кюри находится в качественном согласии с экспериментальными данными [6].

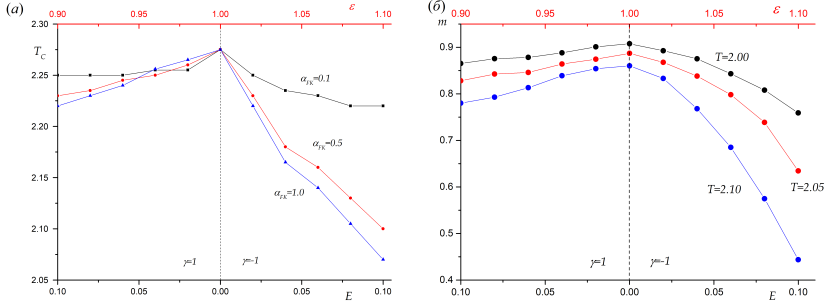


Рис. 3 — (а) Зависимость температуры Кюри от напряженности внешнего электрического поля при различных амплитудах потенциала подложки, (б) зависимость намагниченности тонкой плёнки от напряженности внешнего электрического поля для $\alpha_{FK}=1.0$ при T ниже точки Кюри

На рисунке 3 (б) приведена зависимость намагниченности тонкой пленки от напряженности внешнего электрического поля при различных температурах вблизи фазового перехода.

Результаты моделирования сравнивались с аналитическими выражениями, полученными из теории среднего поля. Полученная зависимость квадрата намагниченности тонкой пленки от напряженности электрического поля, приложенного к подложке носит линейный характер:

$$m^2 = A + \beta E. \quad (4)$$

Причем $A \sim \alpha(T - T_0)$, где α и β - положительные постоянные, T_0 температура Кюри ФМ плёнки в отсутствии внешнего воздействия. Для сравнения этого вывода с результатами компьютерного моделирования был построен график зависимости $m^2(E)$ при различных температурах (рисунок 4).

Зависимость $m^2(E)$ близка к линейной при малых значениях E . Повышение температуры приводит к параллельному смещению графика вдоль оси y . Изменение температуры фазового перехода в тонкой пленке под влиянием деформаций подложки во внешнем электрическом поле можно записать как:

$$T_C = T_0 - const E, \quad (5)$$

где $const$ - положительная постоянная, зависящая от конкретного вещества. Таким образом, внешнее электрическое поле приводит к

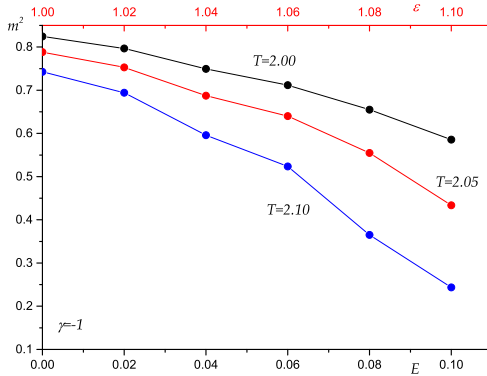


Рис. 4 — Зависимость квадрата намагниченности тонкой пленки от напряженности электрического поля при различных температурах ($\alpha_{FK} = 1.0$)

линейному снижению температуры Кюри в тонкой пленке на СЭ подложке. Если сравнить эти результаты с рисунком 3 (а), можно сделать вывод, что теория среднего поля применима только при слабых полях.

В четвёртой главе исследовано влияние подложки на температуру магнитного фазового перехода в 2D-магнетике. Влияние подложки моделировалось при помощи двумерного периодического потенциала Френкеля-Конторовой, в отличие от главы 3, в которой внешнее электрическое поле было направлено вдоль оси x и фактически подложка деформировалась только вдоль оси x . Гамильтониан модели совпадает с выражением (2).

При несовпадении межатомного расстояния в невозмущенной плёнке и периода потенциала подложки ($a_0 \neq b$) большое значение имеет выбор граничных условий. Если крайние атомы закреплены на границе подложки, а коэффициент покрытия (т.е. отношение числа частиц к числу минимумов потенциала) равен единице, остальные атомы размещаются в минимумах потенциальной энергии подложки [7–11]. Происходит линейное увеличение или уменьшение кристаллической решётки. Этот случай легко описывается без использования компьютерного моделирования. Критическая температура изменяется линейно, пропорционально изменению размеров плёнки:

$$\Delta T = 2.269 \frac{\varphi(b - a_0)}{k_B a_0}, \quad (6)$$

где φ - коэффициент при разложении обменного интеграла по малому параметру.

Интерес представляют системы со свободными границами [10; 11]. Для обеспечения свободных границ в двумерной системе производилась фиксация положения одного атома в центре системы с координатами $(x_0 = L/2; y_0 = L/2)$. Положение подложки выбиралось таким образом, чтобы этот атом располагался в минимуме потенциала. Положение остальных атомов в основном состоянии определялось из условия минимума потенциальной энергии.

На рисунке 5 (а) представлена зависимость температуры фазового перехода в плёнке T_C от периода потенциала подложки b при значениях амплитуды потенциала $\alpha_{FK} = 0.01$ и $\alpha_{FK} = 0.1$. При уменьшении периода подложки ($b < 1$) происходит уменьшение постоянной решётки плёнки. Вследствие этого увеличивается значение обменного интеграла, что приводит к росту температуры Кюри. Упругое взаимодействие между атомами приводит к тому, что атомы находятся не в минимумах потенциала подложки, поэтому изменение температуры фазового перехода носит нелинейный характер. На рисунке 5 (а) видно, что чем выше амплитуда потенциала подложки, тем кривая температуры Кюри ближе к прямой.

При деформациях сжатия, соответствующих $b < 0.95$ и низкой амплитуде потенциала подложки, температура фазового перехода выходит на постоянное значение. При растяжении, соответствующему некоторому критическому значению периода b_c ($b > b_c$), происходит резкий скачок температуры фазового перехода с дальнейшим её плавным уменьшением. Для $\alpha_{FK} = 0.1$ критическое значение $b_c = 1.06$, для $\alpha_{FK} = 0.01$ критическое значение $b_c = 1.05$. Как показал анализ конфигурации размещения атомов, при $b > b_c$ происходит перестройка кристаллической решётки плёнки, то есть в системе наблюдается

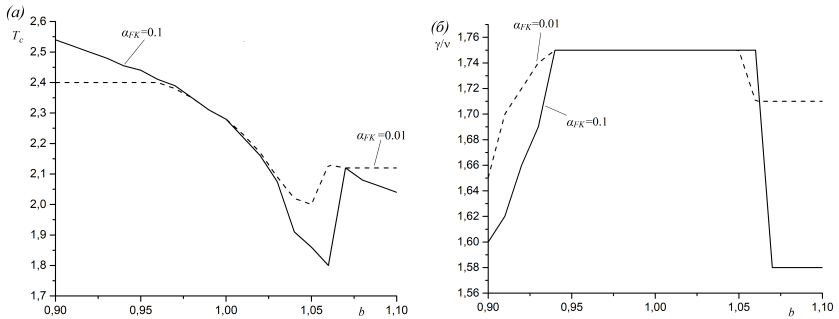


Рис. 5 — Зависимость (а) температуры фазового перехода в плёнке T_C и (б) отношения критических индексов γ/ν от периода потенциала подложки b при различных значениях амплитуды потенциала α_{FK} (сплошная линия — $\alpha_{FK} = 0.1$, пунктирная линия — $\alpha_{FK} = 0.01$)

структурный фазовый переход. Точка $b = b_c$ является тройной: в ней происходит пересечение линии структурного фазового перехода с линией ФМ фазового перехода. Причём изменение кристаллической решётки происходит скачкообразно, что говорит о фазовом переходе первого рода. Изменение геометрии системы также подтверждается зависимостью отношения критических индексов γ/ν от периода потенциала подложки, приведённой на рисунке 5 (б).

Для отношения критических индексов γ/ν наблюдается ступенчатое изменение при $b > b_c$. Происходит перестройка системы, которая переводит её в новый класс универсальности критического поведения (с другим набором критических индексов). Из рисунка 5 (б) видно, что изменение класса универсальности также происходит при $b < 0.95$ и сопровождается не скачкообразным изменением критической температуры, а плавным изменением критических индексов. Отсюда можно сделать вывод, что при деформации сжатия, соответствующей уменьшению периода потенциала подложки на 5%, также происходит структурный фазовый переход. Однако этот переход является переходом 2 рода и происходит в виде непрерывного изменения кристаллической структуры.

В пятой главе приведено исследование влияния температуры, внешнего магнитного поля и периодического ФК-потенциала на свойства 2D-магнетика со скирмионной структурой, которая обеспечивалась наличием взаимодействия Дзялошинского-Мория и анизотропии в энергии системы. Гамильтониан такой модели будет выглядеть следующим образом [12]:

$$\begin{aligned}
 H = & -D \sum_{i,j} ((\mathbf{S}_{i,j} \times \mathbf{S}_{i,j+1})^x + (\mathbf{S}_{i,j} \times \mathbf{S}_{i+1,j})^y) \\
 & - J \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \cdot (\mathbf{S}_{i,j+1} + \mathbf{S}_{i+1,j}) + A_1 \sum_{i,j} \left((S_{i,j}^x)^4 + (S_{i,j}^y)^4 + (S_{i,j}^z)^4 \right) \quad (7) \\
 & - A_2 \sum_{i,j} (S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i+1,j}^y) - h \sum_{i,j} S_{i,j}^z,
 \end{aligned}$$

где D – взаимодействие Дзялошинского-Мория, A_1 и A_2 – постоянные анизотропии. При моделировании был использован стандартный алгоритм Метрополиса. Для анализа полученных конфигураций магнитной системы использовалось Фурье преобразование $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ усреднённой спиновой конфигурации $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle$. Для определения типа полученной конфигурации строился профиль интенсивностей $|\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$ в плоскости (k_x, k_y) .

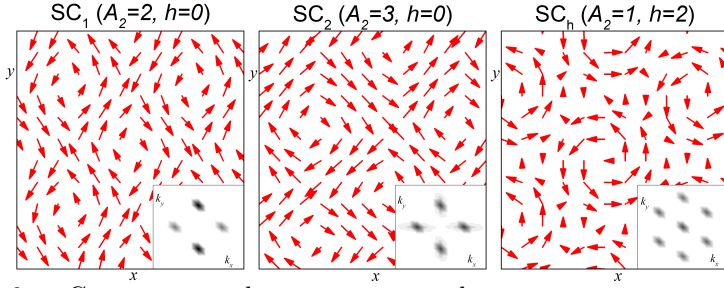


Рис. 6 — Спиновая конфигурация и профиль интенсивностей $|\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$ для скирмионных фаз при низкой температуре ($T = 0.01$). Стрелками обозначены направления спинов в плоскости (x, y) .

Варьируя параметры A_1 , A_2 и h , можно добиться нескольких видов спиновых конфигураций. Здесь рассматривались только скирмионные конфигурации SC . Усредненные спиновые конфигурации и профили интенсивностей скирмионных фаз SC_1 , SC_2 , SC_h при $T = 0.01$ изображены на рисунке 6. Фаза SC_1 и SC_2 образуются в результате суперпозиции двух спиралей спинов ($[10]$ и $[01]$), фаза SC_h промодулирована в трёх направлениях, отстоящих друг от друга на 120° . Профиль интенсивности для фазы SC_h имеет шестиугольную форму.

Влияние магнитного поля на магнитную структуру системы показано на рисунке 7. При $h = 0$ для фаз SC_1 и SC_2 отчетливо видны области формирования скирмионов (светлые участки) и антискирмионов (темные участки). С повышением магнитного поля периодическая структура разрушается, и появляются одиночные скирмионы. Спиральная фаза SS переходит в скирмионную SC_h , но при дальнейшем увеличении поля одиночные скирмионы не появляются.

Исследование влияния температуры на скирмионную структуру показывает, что с повышением температуры для фазы SC_1 пропадает периодичность структуры по одной из осей (около $T = 0.2$), т.е. одна спиновая спираль исчезает. При дальнейшем повышении температуры пропадает периодичность и по второй оси, и при температуре $T > 0.5$ усредненные направления спинов близки к нулю. Периодическая структура фазы SC_2 начинает разрушаться при более высоких температурах ($T > 0.4$), чем в случае SC_1 . При этом периодичность структуры по осям x и y исчезает равномерно, и система не переходит в состояние с одной спиралью.

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

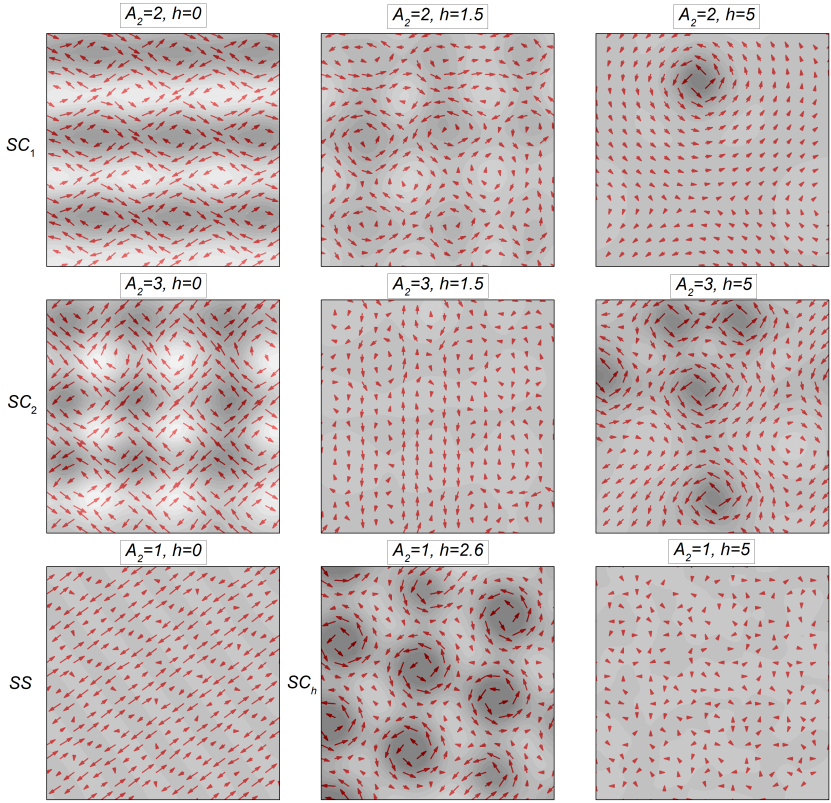


Рис. 7 — Изменение магнитной структуры фаз SC_1 , SC_2 , SS под действием магнитного поля. Темными и светлыми участками обозначены значения локальной хиральности. Красными стрелками обозначены направления спинов в плоскости (x,y) .

Влияние температуры на спиновую структуру исследовано с помощью определения параметра порядка Q [13]:

$$Q(T) = \frac{1}{L^2 n_{step}} \sum_r \left| \sum_{n_{step}} \mathbf{S}_r(T) \cdot \mathbf{S}_r^0 \right|, \quad (8)$$

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

Основные состояния системы для трёх скирмионных фаз были рассчитаны при нулевой температуре с помощью алгоритма Метрополиса. Расчет показал, что основным состоянием системы при параметрах $(A_2, h) = (2, 0)$ и $(3, 0)$ является скирмионная фаза, состоящая из двух спиновых спиралей. Однако для $(A_2, h) = (1, 2)$ получить основное состояние не удалось.

В качестве основного состояния также были рассмотрены конфигурации, полученные следующим путем. Наличие перехода из одной конфигурации к другой можно отследить по изменению профиля интенсивности $|\langle \mathbf{S}_k \rangle|^2$. Поэтому в качестве основного состояния были приняты спиновые конфигурации, полученные с помощью обратного Фурье-преобразования профилей интенсивности, в которых были оставлены только основные пики. Полученные зависимости $Q(T)$ представлены на рисунке 8.

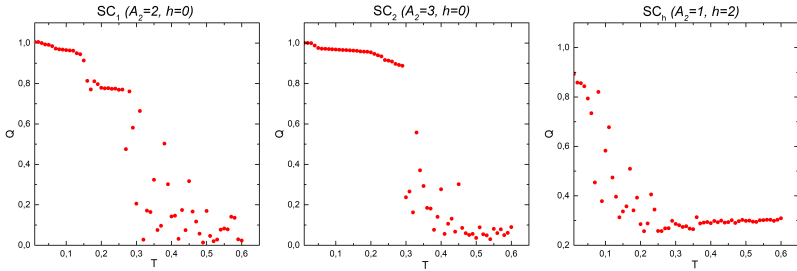


Рис. 8 — Зависимость параметра порядка от температуры для скирмионных фаз SC_1 , SC_2 , SC_h .

По зависимости $Q(T)$ для фазы SC_1 можно сделать вывод о том, что переход в парамагнитную фазу осуществлялся в два этапа. Для $T < 0.1$ фаза SC_1 сохраняется, в промежутке от $T = 0.1$ до 0.2 пропадает упорядочение по оси x , а для $T > 0.3$ пропадает порядок по оси y . При этой же температуре начинает разрушаться фаза SC_2 . Фаза SC_h начинает разрушаться ещё при температуре $T < 0.1$ и к $T \approx 0.3$ переходит в ФМ фазу.

Учёт периодического потенциала, моделирующего влияние подложки на магнетик, оказал влияние на процесс формирования магнитного порядка в определенном температурном диапазоне (рисунок 9). На графике для SC_1 можно заметить, что при наличии подложки скирмионная структура начинает разрушаться при $T > 0.2$ не переходя в состояние с одной спиновой спиралью. При этом, в случае если период потенциала больше постоянной решетки магнетика, скирмионная

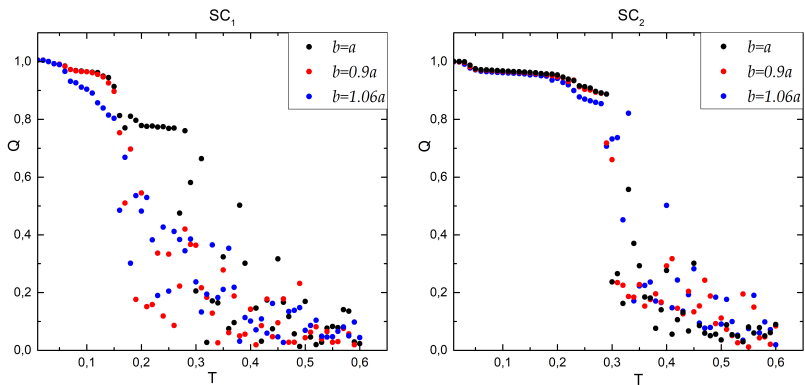


Рис. 9 — Зависимость $Q(T)$ при различных значениях периода потенциала подложки b .

структура начинает разрушаться раньше. Для фазы SC_2 существенного влияния потенциала подложки на спиновые конфигурации замечено не было.

В заклЮчении представлены основные результаты диссертационной работы, которые заключаются в следующем:

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

и температуры на формирование магнитного порядка. Показано, что с помощью внешнего магнитного поля можно добиться перехода из фазы со спиральным магнитным упорядочением в фазу со скирмионным магнитным порядком. При учёте периодического потенциала подложки разрушение скирмионной структуры происходит при более низкой температуре, а также изменяется характер перехода из скирмионной в парамагнитную фазу.

Публикации автора по теме диссертации

В изданиях, рекомендованных ВАК

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

В изданиях, входящих в международную базу цитирования Web of Science

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

В изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus

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

В сборниках трудов конференций

- A6. *Bychkov, I.* MONTE CARLO SIMULATION OF A PHASE TRANSITION IN A QUASI-ONE-DIMENSIONAL MULTIFERRROIC ON A SUBSTRATE / I. Bychkov, I. Maltsev // VIII International Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism», August 22–26, 2022, Kazan, Russia. — 2022. — P. 350.

- A7. *Бычков, И. В.* Монте-Карло моделирование одномерного мультиферройка на подложке / И. В. Бычков, И. В. Мальцев // Дни калорики в Королёве: функциональные материалы и их приложения, 16-20 августа 2022 г., г. Королёв. — 2022. — С. 129—131.
- A8. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на магнитную структуру 2D-магнетика / И. В. Мальцев, И. В. Бычков // Дни калорики в Королёве: функциональные материалы и их приложения, 27-31 мая 2023 г., г. Дербент. — 2023. — С. 83—86.
- A9. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на магнитную структуру 2D-магнетика на подложке / И. В. Мальцев, И. А. Кузнецов, И. В. Бычков // XV Международный семинар «Магнитные фазовые переходы», 10-15 сентября 2023 г., г. Махачкала. — 2023. — С. 26—28.
- A10. *Мальцев, И. В.* Влияние температуры на скирмионную структуру 2D-магнетика на подложке / И. В. Мальцев, И. А. Кузнецов, И. В. Бычков // XXIII Всероссийская школа - семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-23). — 2023. — С. 114.

Список литературы

1. *M. Steiner, J. V.* Theoretical and experimental studies on one-dimensional magnetic systems / J. V. M. Steiner, C. Windsor // *Advances in Physics*. — 1976. — Vol. 25, no. 2. — P. 87—209.
2. A review of 1D magnetic nanomaterials in microwave absorption / X. Su, Y. Liu, Z. Liao, [et al.] // *Journal of Materials Science*. — 2023. — Vol. 58, issue 2. — P. 636—663.
3. *Люксютов, И. Ф.* Двумерные кристаллы. / И. Ф. Люксютов, А. Г. Наумовец, В. Л. Покровский. — Киев: Наукова думка, 1988. — 220 с.
4. Исследование фазового перехода в двумерной структурированной наносистеме / С. В. Белим, И. В. Бычков, Д. А. Кузьмин [и др.] // *Челяб. физ.-матем. журн.* — 2020. — Т. 5, 4(1). — С. 463—470.
5. Ferroelectricity in an Ising Chain Magnet / Y. J. Choi, H. T. Yi, S. Lee, [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100, issue 4. — P. 047601.

6. Impact of compressive and tensile epitaxial strain on transport and nonlinear optical properties of magnetoelectric $\text{BaTiO}_3\text{-(LaCa)MnO}_3$ tunnel junction / M. S. Ivanov, A. M. Buryakov, P. M. Vilarinho, [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2021. — Vol. 54, no. 27. — P. 275302.
7. *Aubry, S.* The discrete Frenkel-Kontorova model and its extensions: I. Exact results for the ground-states / S. Aubry, P. Le Daeron // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 1983. — Vol. 8, no. 3. — P. 381—422.
8. *Chou, W.* Ground states of one-dimensional systems using effective potentials / W. Chou, R. B. Griffiths // Phys. Rev. B. — 1986. — Vol. 34, issue 9. — P. 6219—6234.
9. *Hupalo, M.* “Devil’s Staircase” in Pb/Si(111) Ordered Phases / M. Hupalo, J. Schmalian, M. C. Tringides // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 90, issue 21. — P. 216106.
10. The ground state of the Frenkel–Kontorova model / A. Y. Babushkin, A. K. Abkaryan, B. S. Dobronets, [et al.] // Phys. Solid State. — 2016. — Vol. 58, issue 9. — P. 1834—1845.
11. Ground state of a periodic elastic atomic chain in an arbitrary periodic potential / A. K. Abkaryan, A. Y. Babushkin, B. S. Dobronets, [et al.] // Phys. Solid State. — 2016. — Vol. 58, issue 2. — P. 346—350.
12. Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet / S. D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80, issue 5. — P. 054416.
13. *Edwards, S. F.* Theory of spin glasses / S. F. Edwards, P. W. Anderson // Journal of Physics F: Metal Physics. — 1975. — Vol. 5, no. 5. — P. 965.

Мальцев Иван Валерьевич

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

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать

Формат $60 \times 84 \frac{1}{16}$.

Бумага офсетная.

Усл. печ. л. 1,1. Уч-изд. л. 1,0. Тираж 100 экз.

Заказ № _____. Бесплатно

ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

454001 г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

Издательство Челябинского государственного университета

454136 г. Челябинск, ул. Молодогвардейцев, 576