

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

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

Белим Сергей Викторович

профессор, д.ф.-м.н.

Омск-2023

Оглавление

Оглавление	2
Введение	3
Глава 1. Компьютерное моделирование критического поведения спиновых систем	9
1.1 Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса	9
1.2 Модель Изинга.....	14
1.3 Сопоставление модели Изинга с реальными магнитными материалами.....	18
1.4 Тонкие плёнки	28
1.5 Выводы	36
Глава 2. Исследование критического поведения полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга.....	37
2.1 Введение.....	37
2.2 Описание модели.....	41
2.3 Фазовая диаграмма системы	45
2.4 Поведение системы при $R < R_1$	53
2.5 Критическое поведение приповерхностной области	66
2.6 Обсуждение результатов	67
2.7 Выводы	68
Глава 3. Поверхностный антиферромагнетизм тонких пленок.....	70
3.1 Введение.....	70
3.2 Описание системы.....	71
3.3 Результаты компьютерного эксперимента	77
3.4 Обсуждение результатов	95
3.5 Выводы	98
Публикации автора по теме диссертации	102
Список литературы	105

Введение

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 *Gd* [133], *Tb* [134], *PdFe* [113], Fe_3BO_6 , $FeBO_3$, Fe_2O_3 [8, 10, 70]. 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 работы

Основной целью диссертации является исследование фазовых переходов в ограниченных антиферромагнитных системах методом компьютерного моделирования.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

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.

Объект исследования

Объектом исследования являются полуограниченная антиферромагнитная модель Изинга и тонкие антиферромагнитные пленки.

Предмет исследования

Предметом исследования является изучение поверхностных фазовых переходов в антиферромагнитных системах со свободной поверхностью и тонких антиферромагнитных пленках.

Методы исследования

Исследование проводилось с помощью метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса и теории конечноразмерного 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.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

1. Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные эффекты в конденсированных средах», Махачкала, 2017 г.
2. V Международная научная конференция ФКН «Математическое и компьютерное моделирование», Омск, 2017 г.
3. XI Международная IEEE научно-техническая конференция «Динамика систем, механизмов и машин», Омск, 2017 г.
4. Workshop on Data, Modeling and Security (DMS 2017), Омск, 2017 г.
5. Workshop on Data, Modeling and Security (DMS 2017), Омск, 2018 г.

6. XII Международная IEEE научно-техническая конференция «Динамика систем, механизмов и машин», Омск, 2018 г.

7. X Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 100-летию первого декана математического факультета БашГУ Зигандара Иргалеевича Биглова, Уфа, 2018 г.

8. VII Международная научно-техническая конференция «Проблемы машиноведения», Омск, 2023 г.

9. Международная конференция «Физика и технология перспективных материалов-2023», Уфа, 2023 г.

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.

Глава 1. Компьютерное моделирование критического поведения спиновых систем

1.1 Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса

Методы Монте-Карло (МК) относятся к любому моделированию произвольной системы, в котором используется компьютерный алгоритм, явно зависящий от ряда псевдослучайных чисел. Метод МК особенно важен в статистической физике, где системы имеют большое количество степеней свободы, и величины, представляющие интерес, а именно термодинамически усредненные величины, не могут быть вычислены точно. В системе с D степенями свободы, среднее значение при тепловом равновесии величины A , связанной с каждым микросостоянием системы в равновесии при абсолютной температуре T , задается выражением

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

где x – точка в D -мерном пространстве, представляющая состояние системы, $E(x)$ – энергия системы, $Z = \int e^{\frac{-E(x)}{k_B T}} dx$ – функция распределения. В случае модели конечной решетки, пространство дискретно. Тогда интеграл заменяется суммой по всем конфигурациям

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_x A(x) e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}, \quad (1.2)$$

где различные состояния x системы соответствуют различным конфигурациям. Статистическая сумма равна

$$Z = \sum_x A(x) e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}. \quad (1.3)$$

В случае очень малых цепей все конфигурации и термодинамически усредненные величины (также, как и объемные величины такие как энтропия и

свободная энергия) можно точно вычислить с помощью выражения (1.2). Однако для более длинных последовательностей полный пересчет пространства состояний невозможен с помощью современных компьютеров. В МК-моделировании эта проблема решается заменой множества всех конфигураций в выражении (1.2), легко поддающимся решению подмножеством конфигураций M , где M намного меньше общего числа состояний N . Тогда расчет термодинамически усредненной величины $\langle A_{est} \rangle$ будет выглядеть как:

$$\langle A \rangle_{est} = \frac{\sum_{l=1}^M A(x_l) e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}}{\sum_{l=1}^M e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}}, \quad (1.4)$$

Очевидно, что точность расчета будет напрямую зависеть от качества представленного подмножества конфигураций M . В простом методе выборки, например, где конфигурации M выбираются случайным образом, их подавляющее большинство будет иметь энергию, сильно отличающуюся от средней энергии системы при температуре T , и их вклад будет незначительным. Поэтому расчет, полученный с помощью простой выборки, будет очень неточным, до тех пор, пока M не станет таким же большим, как N .

Идея выборки по значимости при МК-моделировании состоит в том, чтобы выбрать репрезентативный набор конфигураций не совсем произвольно, а так, чтобы выбор был каким-то образом смещен в сторону конфигураций, которые ближе к равновесному состоянию. В большинстве случаев, если $P_{samp}(x_l)$ – вероятность того, что данная конфигурация x_l появляется в выборке, репрезентативной для конфигураций, то выражение (1.4) становится равным:

$$\langle A \rangle_{est} = \frac{\sum_{l=1}^M \frac{A(x_l) e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}}{P_{samp}(x_l)}}{\sum_{l=1}^M \frac{e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}}{P_{samp}(x_l)}}, \quad (1.5)$$

В частности, если конфигурации выбраны с вероятностью

$$P_{samp}(x_l) \sim e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}, \quad (1.6)$$

то оценка для термодинамически усредненной величины становится равной:

$$\langle A \rangle_{est} = \frac{\sum_{l=1}^M A(x_l)}{M}, \quad (1.7)$$

Выборки репрезентативных конфигураций генерируются алгоритмом Метрополиса благодаря тому, что вероятность появления данной конфигурации пропорциональна ее коэффициенту Больцмана. Алгоритм строит цепь Маркова для конфигураций, в которой первая конфигурация x_1 , выбирается произвольно, а соответствующая вероятностная функция $W(x_{i-1} \rightarrow x_i)$, используется для построения любой конфигурации x_i из предыдущей конфигурации x_{i-1} . $W(x_{i-1} \rightarrow x_i)$ – это вероятность «перехода» от конфигурации x_{i-1} к x_i . В общем случае для того, чтобы такая цепочка конфигураций сходилась к каноническому распределению, достаточно ввести условие детального равновесия, согласно которому для любой произвольной пары конфигураций x_l и x_m должно выполняться равенство

$$P_{eq}(x_l)W(x_l \rightarrow x_m) = P_{eq}(x_m)W(x_m \rightarrow x_l), \quad (1.8)$$

где $P_{eq}(x) = \frac{e^{\frac{-E(x)}{k_B T}}}{Z}$ – равновесная вероятность для конфигурации x . Условие детального равновесия (1.8) подразумевает, что при равновесии среднее число переходов $x_l \rightarrow x_m$ совпадает со средним числом обратных переходов $x_m \rightarrow x_l$.

Поскольку это верно для любых двух произвольных конфигураций, из этого следует, что если система в равновесии подвергается изменениям, которые подчиняются условию детального равновесия, вероятность любой конфигурации не изменится, и система останется в равновесии. Если система не находится в равновесии, то отношение между вероятностями любых двух конфигураций имеет тенденцию к росту, если оно изначально ниже равновесного значения, и к

уменьшению, если оно изначально выше его равновесного значения. Следовательно, при достаточно длительном моделировании, система достигнет термодинамического равновесия.

Обычно устанавливается ограничение на возможные переходы от определенной конфигурации только к конкретному числу «смежных» конфигураций. Детальное равновесие (1.8) требует выполнения следующего условия для любых двух конфигураций x_l и x_m :

1. Если $W(x_l \rightarrow x_m) = 0$, то и $W(x_m \rightarrow x_l) = 0$.
2. Если $W(x_l \rightarrow x_m) \neq 0$, то

$$\frac{W(x_l \rightarrow x_m)}{W(x_m \rightarrow x_l)} = \exp\left(-\frac{E(x_m) - E(x_l)}{k_B T}\right)$$

Таким образом, переход от одной конфигурации к другой возможен, тогда, и только тогда, когда возможен обратный переход, или, другими словами, две произвольные конфигурации должны быть обязательно либо взаимно смежными, либо несмежными. Также, если две конфигурации являются взаимно смежными, то вероятность перемещения между ними связана с вероятностью обратного перемещения четко определенным отношением, зависящим только от разницы в энергии между двумя состояниями.

Правила, которые определяют, какие конфигурации являются смежными с любой произвольной конфигурацией задаются набором переходов, используемым в моделировании. До тех пор, пока соблюдается детальное равновесие, фиксированный набор переходов не должен влиять на равновесное каноническое распределение, достигнутое после достаточно долгого времени, но он может сильно влиять на скорость, при которой достигается это распределение. Соответствующий набор переходов, в котором смежные конфигурации мало отличаются друг от друга, также предполагает следующую динамическую интерпретацию цепи Маркова для конфигураций, сгенерированных во время моделирования: количество сгенерированных конфигураций считается пропорциональным времени. Исходя из этих рассмотренных факторов,

термодинамические свойства системы не зависят от конкретного выбора набора переходов, тогда как кинетические свойства – зависят.

Алгоритм Метрополиса выглядит следующим образом. Первое состояние генерируется произвольно. Из каждой точки построенной цепочки конфигураций предпринимается попытка перехода к новой конфигурации. Если разница между энергией новой и энергией текущей конфигурации (ΔE) отрицательна (т.е. энергия результирующей конфигурации меньше энергии текущей конфигурации), тогда новая конфигурация считается приемлемой и становится новым состоянием системы. Если она положительна, генерируется псевдослучайное число R в интервале между 0 и 1 ($0 < R < 1$), и результирующая конфигурация принимается при выполнении неравенства $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} > R$. Если $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} < R$, то полученная конфигурация отклоняется. Всякий раз, когда результирующая конфигурация после попытки перехода отклоняется, новая конфигурация остается неизменной. Для выбора последовательностей используется тот же алгоритм.

Критерий Метрополиса можно обобщить следующим выражением для вероятности предпринятой конфигурации:

$$P_{accept} = \min \left(1, e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \right), \quad (1.9)$$

Заметим, что отношение между вероятностями переходов связано с вероятностью обратного перехода, которую можно записать тем же соотношением, что и в выражении (1.9). Поскольку вероятность перехода между двумя конфигурациями является произведением вероятности попытки данной смежной конфигурации $P_{attempt}$ и вероятности конфигурации P_{accept} , то условие детального равновесия справедливо только для описанного алгоритма, поскольку $P_{attempt}$ является постоянной. По этой причине локальные переходы, которые не совместимы с конфигурацией, должны рассматриваться при выборе новой конфигурации, даже если они всегда будут отклоняться.

Средние значения величин, рассчитанные по длинным траекториям Монте-Карло из выражения (1.7), считаются хорошими оценками для истинного значения термодинамически усреднённых величин. Поэтому можно утверждать, что $\langle A \rangle_{est} = \langle A \rangle$.

1.2 Модель Изинга

Модель Изинга, разработанная в 1925 году Эрнстом Изингом и Вильгельмом Ленцем [87], является основой моделирования магнитных систем. Для простоты предполагается, что магнитные моменты сильно анизотропны, т.е. они могут быть направлены только в одну сторону пространства. Классические спины $S_i = \pm \frac{1}{2}$ размещают на гиперкубической решетке с взаимодействием по ближайшим соседям. Поэтому Гамильтониан задается в виде:

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

Первое слагаемое в выражении (1.10) отвечает за парное взаимодействие между двумя соседними спинами S_i и S_j . Когда $J_{ij} = -J < 0$, энергия сводится к минимуму путем выравнивания всех спинов, т.е. устанавливается ферромагнитный порядок, когда $J_{ij} = J > 0$, энергия минимизируется путем обеспечения отрицательного произведения всех соседних спинов. В этом случае получается ступенчатый антиферромагнитный порядок для $T \rightarrow 0$. « $\langle i,j \rangle$ » представляет собой сумму по ближайшим соседним парам спинов на решетке. Вторая сумма в выражении (1.10) представляет собой взаимодействие с внешним полем напряженностью h . Эта простая модель отражает все явления, обнаруженные в статистической механике и физике фазовых переходов. Она имеет точное решение в одномерном пространстве и в двумерном для $h = 0$, и, следовательно, является отличной экспериментальной платформой для алгоритмов. Кроме того, в пространствах размерностью больше единицы, она претерпевает температурный переход в упорядоченное состояние.

Измерение намагниченности системы – это простой способ для количественной оценки температурной зависимости перехода в ферромагнитном материале:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (1.11)$$

Когда все спины параллельны, т.е. при низких температурах (ниже температуры перехода), намагниченность близка к единице. Для температур, значительно превышающих температуру перехода T_c , спины колеблются в широком диапазоне и поэтому, в среднем, намагниченность равна нулю. Поэтому намагниченность играет роль параметра порядка, который равен $\frac{1}{2}$ в упорядоченной фазе и равен нулю в неупорядоченной фазе.

При непрерывных фазовых переходах [83] не проявляется скрытая теплота фазового превращения. При непрерывном фазовом переходе у свободной энергии существует особая точка, которая обычно проявляется через степенное поведение производных измеряемых величин в критическом состоянии. Длина корреляции ξ [83] является расходящейся в точке фазового перехода. Её поведение может быть описано степенной функцией.

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (1.12)$$

где ν – критический индекс, T – температура системы, T_c – температура перехода. Достаточно близко к переходу ($|T - T_c|/T_c \ll 1$) поведение измеряемых величин может быть хорошо описано степенными законами. Например, удельная теплоемкость c_V имеет особую точку при T_c :

$$c_V \sim |T - T_c|^{-\alpha}, \quad (1.13)$$

показатель степени α (в отличие от ν) может быть как отрицательным, так и положительным. Намагниченность не изменяется, но имеет единственный излом при температуре равной T_c , т.е.

$$m \sim |T - T_c|^{-\beta} \quad (1.14)$$

при $\beta > 0$.

Можно доказать, что критические индексы связаны через скейлинговые соотношения, используя методы из ренормгруппы [69]. Чаще всего (как и в случае модели Изинга) только два индекса являются независимыми и полностью характеризуют критическое поведение модели. Также можно показать, что модели в статистической физике в целом подчиняются универсальному поведению, т.е., если геометрия решетки сохраняется одинаковой, критические индексы зависят только от симметрии параметра порядка. Поэтому при моделировании статистической модели достаточно найти расположение температуры перехода T_c , а также определить два независимых критических индекса, чтобы полностью охарактеризовать класс универсальности системы.

Когда система не бесконечно большая, критическое поведение размывается. Воспользовавшись доказательствами из ренормгруппы, можно показать, что неаналитическая часть заданной измеряемой величины может быть описана с помощью метода конечно-размерного скейлинга [126]. Например, при моделировании системы Изинга с L^d количеством спинов конечно-размерная намагниченность задается асимптотически (близко к переходу и для больших L)

$$\langle m_L \rangle \sim L^{\beta/\nu} \tilde{M}[L^{1/\nu}(T - T_c)], \quad (1.15)$$

а выражение для магнитной восприимчивости выглядит как

$$\chi_L \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{C}[L^{1/\nu}(T - T_c)], \quad (1.16)$$

причем близко к переходу восприимчивость $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$ (для бесконечной системы, $L \rightarrow \infty$) и

$$\chi = \frac{L^d}{kT} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (1.17)$$

\tilde{M} и \tilde{C} – неизвестные скейлинговые функции. Уравнения (1.15) и (1.16) показывают, что при $T = T_c$, значения $\langle m_L \rangle / L^{\beta/\nu}$ и $\langle \chi_L \rangle / L^{\gamma/\nu}$, моделируемые для разных размеров системы L , должны пересекаться в одной точке для широкого предела значений L , при условии, что мы используем правильные выражения для β/ν и γ/ν , соответственно. На самом деле, существуют неаналитические поправки к скейлингу, и поэтому точки пересечения между двумя

последовательными парами размеров системы (например, L и $2L$) сходятся к общей точке пересечения при $L \rightarrow \infty$, которая совпадает с температурой объемного перехода T_c . Использование конечно-размерного скейлинга при вычислении намагниченности или восприимчивости не очень эффективно, так как ни β , ни γ заведомо неизвестны. Существуют и другие подходы к их определению, но одним из наиболее простых методов является определение безразмерных комбинированных величин. Одна из таких величин, известная как коэффициент Биндера («кумулянт Биндера») [30], задается формулой:

$$U = \left[1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \right] \sim \tilde{G}[L^{1/\nu}(T - T_c)] \quad (1.18)$$

Различные условия обеспечивают, что $U \rightarrow 2/3$ при $T \rightarrow 0$ и $U \rightarrow 0$ при $T \rightarrow \infty$. Асимптотическое скейлинговое поведение кумулянта Биндера для больших L следует из того, что коэффициенты перед намагниченностью ($m^k \sim L^{k\beta/\nu}$) в уравнении (1.18) сокращаются.

Кумулянт Биндера – безразмерная величина и поэтому значения для различных размеров системы L приблизительно пересекаются в точке предполагаемого перехода, при условии, что поправки к скейлингу малы. Кроме того, при точном выборе правильного значения критического индекса ν , значения расположены на универсальной кривой. Таким образом, метод позволяет оценить T_c , а также критический индекс ν .

Также могут быть использованы другие безразмерные величины, такие как двухточечная корреляционная функция [21, 122]. В этом случае получатся аналогичные результаты.

1.3 Сопоставление модели Изинга с реальными магнитными материалами

Чтобы определить параметры материалов с микроскопическим Изинг-подобным гамильтонианом, необходимо разобраться в поведении отдельных магнитных ионов в кристаллической среде [12].

Чтобы материал описывался моделью Изинга необходимо выполнение двух условий. Во-первых, основное состояние иона должно быть дуплетом, хорошо отделенным от возбужденных состояний ($\Delta E \gg k_B T_c$). В идеале дуплет должен быть «Крамеровски» вырожденным, что соответствует нечетному числу электронов в ионе; большинство исследованных материалов удовлетворяли этому критерию. Ионы с четным числом электронов также могут иметь дважды вырожденные состояния, если симметрия достаточно высока, но любое небольшое изменение симметрии расщепит дуплет. Такое расщепление может быть небольшим или большим в сравнении с другими эффектами, однако часто его просто не учитывают. На практике более безопасно использовать ионы с нечетным числом электронов.

Второе условие заключается в квантово-механическом описании двух ионных состояний. Важным критерием является то, что все матричные элементы, связывающие два состояния каждого из взаимодействующих ионов, должны исчезнуть для всех операторов, участвующих в спин-спиновых взаимодействиях. На практике обычные взаимодействия содержат обменные и дипольные связи, в которых используются операторы, преобразующиеся как векторы, например, $J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$. Для таких операторов существует правило выборки: $\Delta m = 0; \pm 1$, где m – любое квантовое число углового момента. Также возможны взаимодействия с тензорами более высокого ранга, такими как анизотропный обмен или квадрупольно-квадрупольная связь [167]; для того, чтобы их исключить также необходимо найти дуплетные состояния, в которых такие взаимодействия не имеют матричных элементов между двумя состояниями.

Соответствующие случаи были найдены во многих редкоземельных соединениях. Первым таким материалом, который отнесли к «Изинг-подобным», был $\text{Dy}(\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, этилсульфат диспрозия (DyES) [43]. Анализ кристаллического поля, проделанный в работе [51], с учетом результатов предыдущих магнитных и оптических измерений вращения [46], показал, что основное состояние является дуплетом «Крамерса» и описывается в первую очередь как $|J = 15/2; J_z = \pm 9/2\rangle$ с небольшой примесью $|J = 15/2; J_z = \mp 3/2\rangle$ и $|J = 15/2; J_z = \mp 15/2\rangle$. Для такого дуплета матричные элементы между состояниями будут иметь только операторы, включающие тензоры ранга 3 или больше, но такие операторы не участвуют ни в одном из обычных обменных и магнитных дипольных взаимодействий. Поэтому можно сделать вывод, что в этом материале гамильтониан микроскопического взаимодействия может быть точно представлен формой Изинга

$$H = \sum_{i>j} K_{ij} \sigma_{zi} \sigma_{zj}, \quad (1.19)$$

где σ_{zi} и $\sigma_{zj} = \pm 1$, а сумма $i > j$ проходит по всем парам взаимодействующих локаций i и j .

В конкретном случае DyES все локальные оси Изинга были параллельны между собой и параллельны оси гексагонального кристалла, однако это не всегда так. Изинговская форма взаимодействия является результатом локальной анизотропии, ось которой определяется точечной симметрией локализации каждого иона. Некоторые из наиболее интересных ситуаций возникают как раз из-за того, что локализирующие оси не всегда параллельны.

В таблице 1 приводится подборка «Изинг-подобных» материалов, которые широко изучались в течение последних 40 лет. Конечно, еще много других Изинг-подобных материалов было изучены, ссылки на эти и другие соединения можно найти в обзорах [115] и [153].

Хорошо изученные «Изинг-подобные» материалы

Химическая формула	Группа симметрии крист. реш-ки	Упорядоченность	T_C (К)	$\Delta E/k_B T_C$	Ссылки
$Dy(C_2H_5SO_4)_3 \cdot 9H_2O$	$R\bar{6}/m$	дипольный ферромагнетик	01	~ 190	[42, 43, 64]
$Dy(C_3Al_5SO_{12}(DyAlG))$	$Ia\bar{3}d$	6-подрешеточный антиферромагнетик	25	27	[68, 103, 147]
$DyPO_4$	$I4_1/amd$	2-подрешеточный антиферромагнетик	34	20	[80, 88, 131, 168]
$LiTbF_4, LiHoF_4$	$I4_1/a$	дипольный ферромагнетик	29	> 50	[13, 64, 75, 82]
Rb_2CoF_4, K_2CoF_4	$I4_1/mmm$	2D антиферромагнетик	101	~ 4	[86, 115, 118]
$Dy_2Ti_2O_7$	$Fd\bar{3}m$	фрустрированный спиновый лед	< 0.05	> 100	[67, 77, 123, 132]

Константы взаимодействия K_{ij} должны быть определены экспериментально для каждого материала, т.к. количественной теории для расчета силы различных взаимодействий из первых принципов не существует. Поскольку все магнитные ионы взаимодействуют через магнитную диполь-дипольную связь, мы можем написать, без каких-либо потерь

$$K_{ij} = D_{ij}(1 + \alpha_{ij}), \quad (1.20)$$

D_{ij} – обозначает магнитную связь. Используя данную формулу константы взаимодействия можно вычислить из экспериментально определенных магнитных моментов взаимодействующих ионов и их взаимного расположения. В большинстве случаев α_{ij} будет существенным только для ближайших соседей, хотя в некоторых случаях взаимодействие не являющееся диполь-дипольным может распространяться и на третьих ближайших соседей [147]. Кроме того, были найдены как положительные, так и отрицательные не являющиеся диполь-дипольными взаимодействия, поэтому на практике необходимо проверять вероятность таких взаимодействий.

Чтобы найти константы взаимодействия, необходимо согласовать экспериментальные данные с теоретическим выражением для термодинамических величин (обычно восприимчивости или удельной теплоемкости) в областях, где

теория асимптотически точна. На практике обычно это области $T \gg T_c$ или $T \ll T_c$, где T_c – критическая температура. Например, восприимчивость для $T \gg T_c$ может быть приведена к асимптотически точному выражению [45, 160]

$$\chi = \frac{\lambda}{T} \left[1 + \frac{\Theta_1}{T} + \frac{(\Theta_1^2 - \Theta_2)}{T^2} + \dots \right], \quad (1.21)$$

где $\Theta_1 = -\frac{1}{k_B} \sum_i K_{ij}$, $\Theta_2 = \frac{1}{k_B^2} \sum_j K_{ij}^2$, тогда как удельная теплоемкость может быть подобрана в виде

$$\frac{C}{R} = \frac{\Theta_2}{2T^2} + \frac{\Theta_3}{3T^3} + \dots \quad (1.22)$$

$$\text{где } \Theta_3 = -\frac{6}{k_B^3} \sum_{j>k} K_{ij} K_{jk} K_{ik}.$$

Следует отметить, что подгонка данных в области, далекой от критической точки, подразумевает поиск очень малых отклонений от идеального поведения. Делать это нужно очень внимательно, чтобы избежать систематических погрешностей из-за дополнительных эффектов, таких как вклад возбужденных состояний, температурная независимая восприимчивость Ван Влека. В удельную теплоемкость также необходимо внести поправки от вкладов решетки и ядерного сверхтонкого взаимодействия.

Можно предположить для очень разреженного материала, такого как DyES, что не являющиеся диполь-дипольными взаимодействия будут очень слабыми, что действительно и было найдено в работе [36]. Поэтому самый первый Изинг-подобный магнетик был также и первым чисто дипольным ферромагнетиком, хотя значимость этого различия стала очевидной намного позже [65], после того, как была разработана теория критических точек и подтверждена важность предельной размерности.

Самые первые эксперименты сравнивались с теорией модели Изинга с использованием различных аппроксимаций, включая: среднее поле, кластерные модели, комбинации точных результатов линейной цепи со средним полем и разложения рядов как при низких, так и при высоких температурах. Два таких

примера [42] для квазиодномерного DyES показаны на рис. 1.1 и 1.2. Получено хорошее совпадение даже с очень простыми приближениями, особенно с учетом того, что нет регулируемых констант.

Разложение в степенной ряд при низких и высоких температурах [49, 61] позволило сравнить магнитные и тепловые параметры в гораздо более широких диапазонах температур, включая критические области. Одним из материалов, для которого получились отличные результаты, был DyPO_4 , примеры [131, 168] показаны на рис. 1.3, 1.4 и 1.5.

Видно, что совпадение с данными очень хорошее, особенно с учетом того, что теория содержит только один регулируемый параметр – взаимодействие по ближайшим соседям. Однако этот успех зависел от некоторых особых факторов, которые заслуживают упоминания.

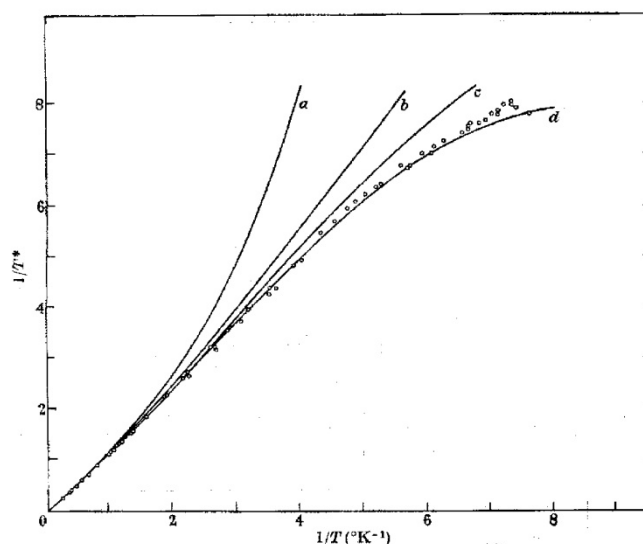


Рисунок 1.1. Изменение $1/T^*$ ($= \chi/\lambda$) в зависимости от $1/T$ для сульфата этила диспрозия. Точки (o) изображают экспериментальные результаты. Кривые представляют собой результаты различных теоретических моделей. [42]

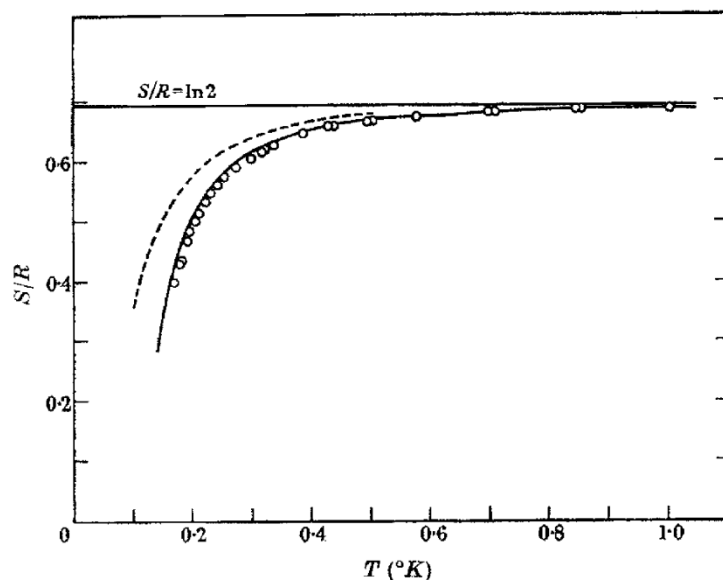


Рисунок 1.2. Энтропия этилсульфата диспрозия в зависимости от температуры. Точки – экспериментальные результаты. Кривые – результаты различных теоретических моделей. [42]

Очень важным оказался выбор материала, поскольку модельные расчеты могли выполняться только на относительно простых решетках. Тот факт, что решетка DyPO_4 очень близка к простой алмазной решетке, стал основным для подробного сравнения с доступными разложениями. С другой стороны, поскольку теоретические разложения рядов чрезвычайно трудоемки, удалось рассмотреть только взаимодействия по ближайшим соседям без учета любых эффектов от дальнедействующих взаимодействий. Такое превосходное совпадение между теорией и экспериментом было в некоторой степени случайным. Однако оно четко демонстрирует тесную связь между моделью Изинга и этим материалом, хотя более поздние исследования выявили трудности, которые до сих пор полностью не изучены [80, 88].

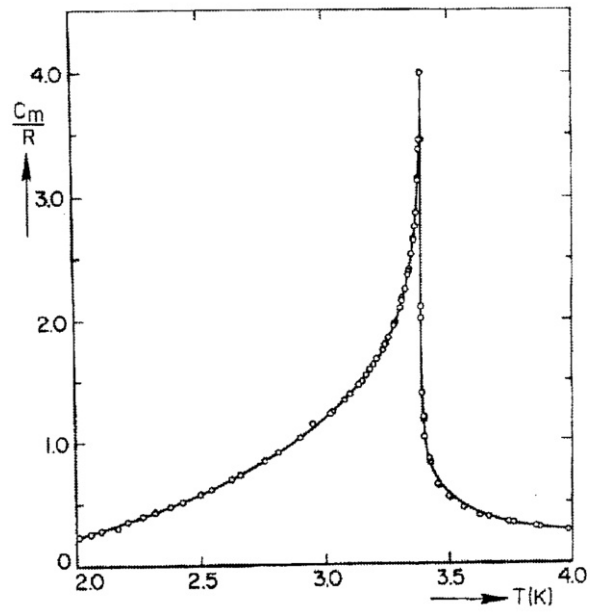


Рисунок 1.3. Магнитная удельная теплоемкость в зависимости от температуры для DyPO_4 . Точки (o) – экспериментальные результаты, сплошная линия – результаты расчетов. [131, 168]

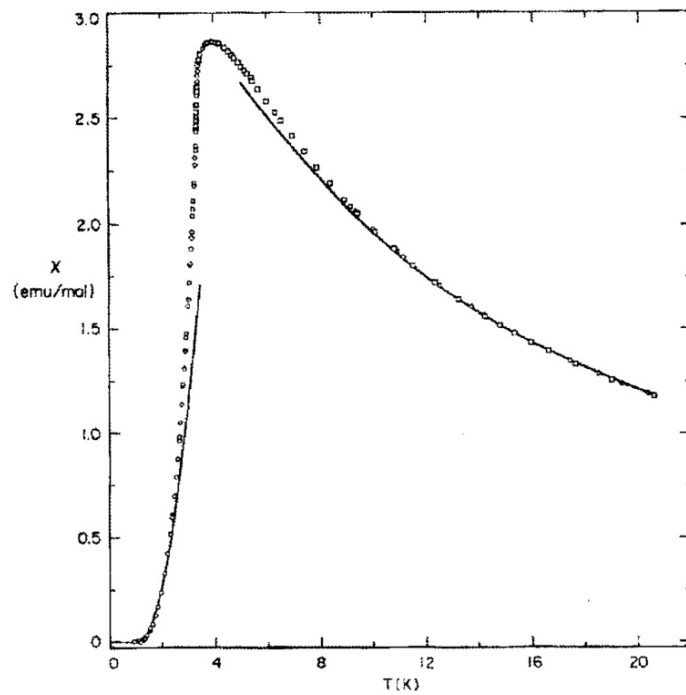


Рисунок 1.4. Магнитная восприимчивость в зависимости от температуры для DyPO_4 . Точки (o) – экспериментальные результаты, сплошная линия – результаты расчета. [131, 168]

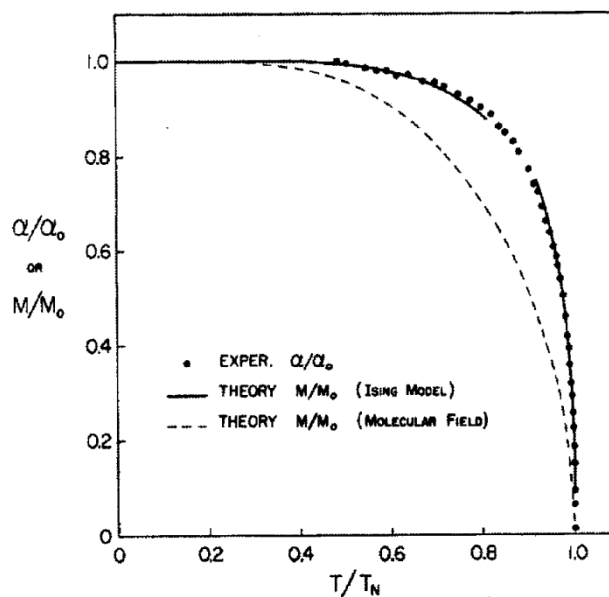


Рисунок 1.5. Спонтанная подрешеточная намагниченность как функция температуры для DyPO_4 . Точки (o) – экспериментальные результаты; две сплошные линии – результаты расчетов. Пунктирная линия изображает данные молекулярной теории поля. [131, 168]

Дальнейшее сравнение теории с экспериментальными данными стало возможным после открытия материалов, в которых решетчатая структура сильно способствовала взаимодействиям внутри плоскости спинов, почти без взаимодействия между плоскостями. Ожидалось, что такие материалы будут вести себя как квазидвухмерные системы и, если критерии Изинга также будут выполнены, дадут возможность сравнить экспериментальные данные с точными результатами по двумерной модели Изинга. Редкоземельных материалов с такими структурами обнаружено не было, однако было обнаружено несколько фторидов металлов, включая переходные металлы. Большинство ионов переходных металлов проявляют относительно небольшую анизотропию и ведут себя больше как системы Гейзенберга. Исключением является ион кобальта, который, как известно, показывает значительную анизотропию во многих материалах. [12]

Два очень похожих материала K_2CoF_4 и Rb_2CoF_4 [35] были признаны как двумерными, так и изингподобными, на рис. 1.6 и 1.7 показаны их восприимчивость [115] и удельная теплота [118] по сравнению с двумерной моделью Изинга с одним регулируемым параметром. Видно, что совпадение очень хорошее. Однако следует отметить ряд трудностей, которые еще раз

показывают, что в этих случаях необходимо проявлять осторожность при сравнении теории с экспериментом.

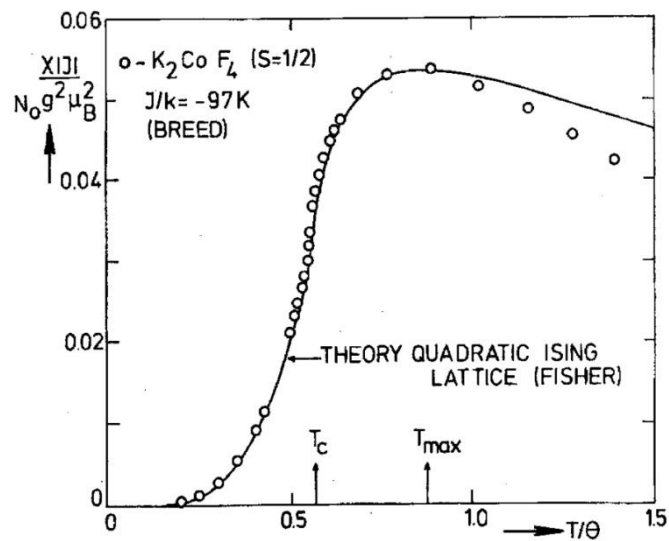


Рисунок 1.6. Магнитная восприимчивость, параллельная оси, в зависимости от температуры для K_2CoF_4 . Точки (o) представляют собой экспериментальные результаты [35], скорректированные для температурного независимого вклада Ван Влека. Линия представляет собой разложение Сайкса и Фишера для квадратичного Изингового антиферромагнетика ($S = 1/2$) с одной регулируемой константой. [115]

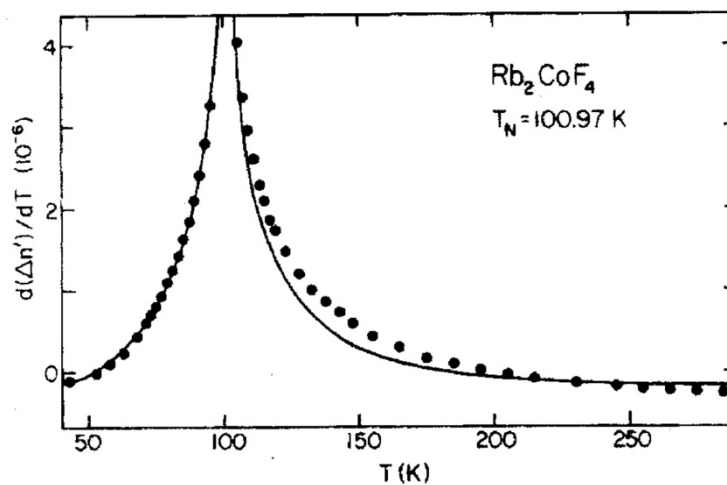


Рисунок 1.7. Изменение магнитной удельной теплоемкости в зависимости от температуры для Rb_2CoF_4 . Точки (●) – экспериментальные результаты измерений. Линия – это точное решение Онсагера для двумерной модели Изинга с амплитудой и критической температурой, скорректированной в соответствии с данными, за минусом небольшого постоянного фонового слагаемого. [118]

Что касается восприимчивости на рисунке 1.8 видно, что значение, измеренное в работе [49], на самом деле, гораздо больше, чем показано на рисунке 1.3, который был скорректирован эмпирически путем вычитания вклада из температурно-независимого парамагнетизма Ван Влека, чтобы учесть наличие

низкорасположенных возбужденных состояний. Можно заметить, что поправка очень велика, и понятно, что поправка на наличие возбужденных состояний в действительности не будет изотропной и независимой от температуры. По всей видимости, именно это объясняет наблюдаемые различия при самых высоких температурах [115].

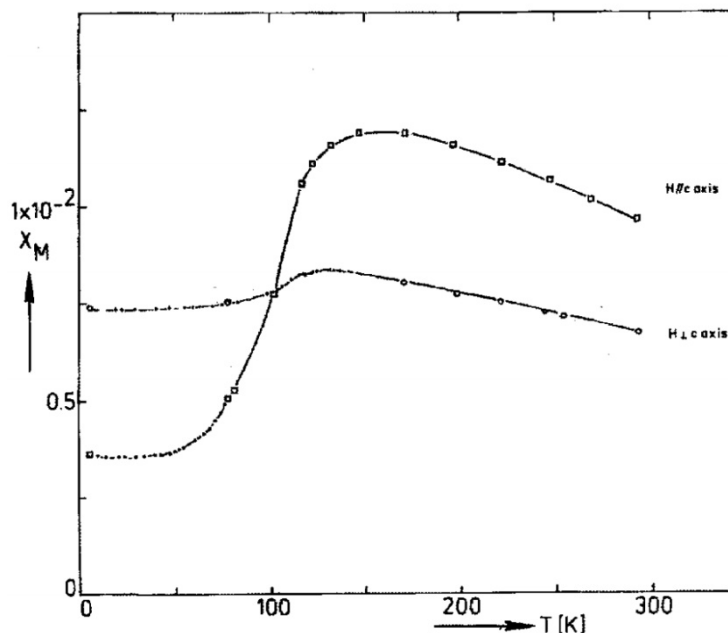


Рисунок 1.8. Магнитная восприимчивость как функция температуры для K_2CoF_4 , без каких-либо поправок. [49]

При сравнении удельной теплоты с точным двумерным решением Онсагера необходимо отметить еще один фактор. Эксперименты по рассеянию нейтронов [86] показали, что неизинговые взаимодействия в этом материале, на самом деле, довольно значительны и составляют около 55% Изинговых компонент, но из близкого совпадения результатов измерений следует, что это почти не имеет значения.

Из этих сравнений можно сделать вывод, что даже достаточно большие различия между модельным и реальным гамильтонианом могут почти не повлиять на сходимость между теорией и результатами экспериментов. Преобладание Изинговых компонент в непосредственной близости от критической точки в этих и даже более изотропных материалах можно понять исходя из эффекта кроссовера.

Высокотемпературные и низкотемпературные разложения в ряд можно экстраполировать для определения критической точки и оценить значения термодинамических свойств при критической температуре, используя различные аналитические методы. В таблице 2, взятой из работы [115], показано некоторое сравнение параметров. Видно, что общее согласие снова весьма удовлетворительно, и можно заключить, что правильно выбранные магнитные материалы хорошо согласуются с расчетами модели Изинга.

Таблица 2

Критические энтропийные и энергетические параметры

	NN ¹	J/k (K)	T _c (K)	S _c /R	-E _c /RT _c
DyPO ₄	4	-2.50	3.39	0.505	–
Dy ₃ Al ₅ O ₁₂	4+	-1.85	2.54	0.489	0.38
CoRb ₃ Cl ₅	6	-0.511	1.14	0.563	0.226
CoCs ₃ Cl ₅	6	-0.222	0.52	0.593	0.173
Ising d.	4			0.511	0.320
Ising s.c.	6			0.558	0.220
Ising f.c.c.	12			0.582	0.172
Ising b.c.c.	8			0.590	0.152

¹ количество ближайших соседей

1.4 Тонкие плёнки

Магнетизм тонких пленок является активной областью исследований с важными технологическими приложениями. Тонкопленочный магнетизм внес важный вклад в фундаментальное понимание физики магнетизма [156-158] вместе с приложениями в информационных технологиях, которые стали активно развиваться после открытия эффекта гигантского магнитосопротивления [20, 29].

Первыми были исследованы достаточно тонкие эпитаксиальные пленки Fe/Ag(001) толщиной несколько моноатомных слоев. Для этих систем было предсказано теоретически [62] и подтверждено экспериментально наличие магнитного упорядочивания. Это явление происходит из-за наличия анизотропии, перпендикулярной плоскости подложки. Перпендикулярная анизотропия также была обнаружена в тонких пленках NiFe (111)/Cu(111) [72, 74]. Позже это явление

было подтверждено для большого класса эпитаксиальных пленок [40, 47, 73, 76, 78, 90, 117, 166] и использовано в перпендикулярных записывающих средах [139].

Для двумерных систем модель Изинга предсказывает магнитное упорядочение при конечных температурах с критическим показателем намагниченности $\beta = 1/8$ [41, 120]. С другой стороны, двумерные XY системы и двумерные системы Гейзенберга не упорядочиваются при конечных температурах [32, 81, 114, 165]. Однако двумерная XY система имеет специфическое критическое поведение, не соответствующее ни порядку, ни беспорядку, которое принято описывать как квазипорядок [124]. Критическое поведение двумерного XY-гамильтониана было подробно изучено в работах [97, 98, 99], которые обнаружили, что эта система действительно имеет критическую точку с дальнедействующими корреляциями, но не имеет спонтанной намагниченности. В рамках ренормгруппового подхода [33, 34] было показано, что конечные системы упорядочиваются магнитно. При этом изменение намагниченности вблизи критической точки имеет критический показатель $\beta \approx 0,23$. Значение этого критического показателя становится неопределенным по мере того, как размер образца достигает бесконечности. Для трехмерного случая все системы упорядочиваются при конечных температурах с критическими показателями намагниченности $\beta = 0,325$ (модель Изинга), $\beta = 0,345$ (XY-модель) и $\beta = 0,365$ (модель Гейзенберга) [93, 105, 106, 152]. Таким образом, по мере увеличения числа степеней свободы или размерности системы критический показатель намагниченности увеличивается по значению (т. е. начало магнитного порядка непосредственно ниже критической точки становится более крутым). Однако эти модели соответствуют идеализации реальных систем, которые часто демонстрируют особенности, нарушающие симметрию гамильтониана, такие как магнитная анизотропия и дальнедействующие магнитные дипольные (и/или обменные) взаимодействия. Эффект магнитной анизотропии заключается в том, чтобы увести систему от критической точки на фазовой диаграмме соответствующего изотропного гамильтониана к новой критической точке с собственным классом универсальности критических показателей. Для малых

анизотропий можно ожидать, что такое изменение значений критических индексов будет небольшим, но оно может значительно отклоняться для сильно анизотропных систем [22, 37, 62, 91, 98]. В двумерном пространстве наличие исчезающе малой анизотропии с легкой осью, перпендикулярной плоскости пленки, приводит к магнитному упорядочиванию изинговского типа при ненулевой температуре (связанной с критической температурой объемного материала) [22]. Этот результат согласуется с моделированием методом Монте-Карло [57] и расчетами из первых принципов [38]. В двумерной XY-системе с анизотропией в плоскости при четвертичной симметрии анизотропии может возникнуть неуниверсальное критическое поведение [91]. Для гексагональной симметрии анизотропии критическое поведение будет идентичным изотропной XY-системе.

Двумерная модель Изинга описывает двумерную решетку спинов, взаимодействующих только через обменное взаимодействие с ближайшими соседями, где спины могут быть направлены вверх или вниз, и поэтому соответствует случаю ферромагнетика с одноосной анизотропией. Длина спин-спиновой корреляции – это максимальное расстояние, на котором коррелируются направления спинов. Если один спин направлен вверх, вероятность того, что его ближайшие соседи также имеют направление вверх, увеличивается, что, в свою очередь, смещает вероятность того, что их ближайшие соседи имеют ориентацию спина вверх. Таким образом, спиновая флуктуация может распространяться на большую площадь решетки в системе только с короткодействующими взаимодействиями, которая расходуется при $T = T_C$. Это означает, что любые два спина, сколь угодно далеко друг от друга, коррелируют друг с другом, и система становится чувствительной к малым возмущениям, например, к приложению внешнего магнитного поля. Вблизи критической температуры намагниченность M , восприимчивость χ и корреляционная длина ξ изменяются с температурой по степенному закону.

$$M \sim |T - T_C|^\beta \quad (1.22)$$

$$\chi \sim |T - T_C|^{-\gamma} \quad (1.23)$$

$$\zeta \sim |T - T_C|^{-\nu} \quad (1.24)$$

Точное экспериментальное определение критических индексов в ультратонких пленках затруднено: разные методы могут давать разные критические температуры в зависимости от пространственного и временного разрешения [94, 125]. Суперпарамагнетизм добавляет еще одну трудность, так как намагниченность системы может флуктуировать быстрее, чем время измерения [156, с. 152]. Морфология пленки [79, 95] может затруднить анализ экспериментальных данных. Когда рост происходит за счет роста островков, каждый островок может иметь большую температуру Кюри, чем эквивалентный осажденный материал, если бы он был сплошной пленкой [59, 71]. Этот эффект наблюдался в пленках $Fe/W(110)$, выращенных при повышенных температурах, в отличие от роста при низких температурах [71, 128]. Однако было обнаружено, что, несмотря на это изменение температуры Кюри, критический показатель β остается постоянным в пределах нескольких первых монослоев [130]. Тот факт, что три параметра должны быть определены из одного набора данных (критическая температура, амплитуда и показатель степени, которые сильно коррелируют друг с другом), усложняет однозначное определение критических индексов [140, 145, 146]. Было предложено несколько схем для минимизации этой проблемы [18, 19, 58, 96].

Трудности в изучении магнетизма тонких пленок связаны с самими системами. Проблемы возникают с выбором температурного окна для измерения критического поведения, наличием магнитных доменов, разрушающих дальние корреляции, а также чувствительностью двумерного фазового перехода к внешнему магнитному полю [38]. Также необходимо учитывать температурное изменение постоянной решетки, которое может изменить значение критической температуры [92]. Намагниченность обычно измеряется при постоянном давлении, тогда как теория предполагает измерения при постоянном объеме.

Эффекты конечного размера размывают критический переход параметра порядка [145, 146]. Например, влияние конечной ширины полосок Fe на критическое поведение пленок $Fe/W(110)$ было показано в работе [56]. В частности, кривая намагничивания имеет хвост, выходящий за критическую температуру [92, 104]. Кроме того, немногие магнитные системы достаточно химически стабильны, чтобы выдерживать необходимые термические циклы. Воздействие остаточных газов может привести к изменению магнитных свойств с течением времени из-за химической связи или эффектов поверхностно-активного вещества [156, с. 152]. Эти факторы ограничивают изучение критических явлений небольшим числом систем. Предпочтение отдается Ni и Gd из-за их низкой температуры Кюри. Другие магнитные элементы изучаются в ограниченном диапазоне толщин, для которых критическая температура ниже температуры, при которой система начинает разрушаться [17]. Критический переход в низкоразмерных системах, как правило, менее резкий и распространяется на более широкий диапазон температур, чем в их трехмерных аналогах [157, с. 297].

Для магнитных тонких пленок наиболее изученным критическим процессом является температурная зависимость параметра порядка (намагниченности) вблизи критической точки. В отличие от критического индекса β значение критической температуры T_c является характеристикой системы. Значение β было определено экспериментально для нескольких тонкопленочных магнитных систем. Список значений, взятых из доступной литературы, приведен в таблице 3.

Таблица 3

Экспериментальные значения температуры Кюри T_c критического индекса намагниченности β для эпитаксиальных пленок

Система	T_c , К	β	Ссылка
5 ML V(100)/Ag(100)	475.1	0.128 ± 0.01	[134, 135]
5–11 ML Fe/Cu(100)	~285	0.17 ± 0.03	[155]
1.2 ML Fe(100)/Pd(100)	~400	0.127 ± 0.004	[109, 110]
2 ML Fe(100)/Pd(100)	613.4	0.125 ± 0.01	[136]
2.5, 2.7 ML Fe/Ag(100)	~500	0.124 ± 0.02	[130]
1.8 ML Fe(110)/Ag(111)	338.1	0.139 ± 0.006	[129]
1.9 ML Fe(110)/Ag(111)	450.5	0.139 ± 0.004	
2.0 ML Fe(110)/Ag(111)	466.4	0.130 ± 0.003	
2 ML Fe/Au(100)	290.0	0.25 ± 0.01	[134]

Продолжение таблицы 3

Система	T_c , К	β	Ссылка
1–2.5 ML Fe/Au(100)	300–500	0.22 ± 0.05	[50]
1.6 ML Fe/W(100)	188.6	0.210 ± 0.012	[55]
1.6 ML Fe/W(100)	207.8	0.217 ± 0.005	
2.0 ML Fe/W(100)	223 ± 1	0.21 ± 0.02	
1.6 ML Fe/W(100)	208	0.22 ± 0.03	[54]
Ag/2.2 ML Fe/W(100)	306	0.22 ± 0.01	
Ag/0.83 ML Fe(110)/W(110)	278 ± 1	0.19 ± 0.02	[71]
Ag/1.0 ML Fe(110)/W(110)	282 ± 3	0.18 ± 0.01	
Ag/1.22 ML Fe(110)/W(110)	285 ± 2	0.193 ± 0.005	
1 ML Fe(110)/W(110)	230	0.123	[56]

В статье [52] дано подробное описание магнитного фазового перехода в пленках толщиной 0–2 моноатомного слоя в пленках $Fe/W(110)$, $Fe/W(100)$ и $Co/Cu(111)$. Следует отметить, что сравнение значений теоретических критических индексов с экспериментальными имеет ряд трудностей [96, 125, 130, 145, 146]. Одна из основных проблем связана с ролью размерных эффектов на кривой намагничивания, которые имеют тенденцию размывать критический переход и усложнять оценку температуры Кюри и критического индекса намагниченности. Кроме того, правильный выбор температурного интервала иногда подвергается критике на том основании, что он часто превышает диапазон температур, в котором поведение намагниченности описывается степенным законом. В статьях [145, 146] показано, что совпадение между экспериментально измеренными эффективными критическими показателями и теоретическими значениями наблюдается при расчете критических индексов по формуле

$$\beta_{eff} = \frac{\partial \log m(t)}{\partial \log t}, \quad t = 1 - \frac{T}{T_c} \quad (1.25)$$

Моделирование методом Монте-Карло показывает, что для температур, вычисленный таким образом критический показатель дает значения, близкие к экспериментальным и идентичные теоретическим значениям. Аналитические выражения, полученные из расчетов ренормализационной группы для критических индексов, зависящих от толщины, также подтверждают адекватность такого подхода [119]. Ожидается, что двумерная модель Изинга будет описывать

критическое поведение тонких пленок с одноосной магнитной анизотропией [22] и $\beta \approx 1/4$. Для тонких пленок с планарной анизотропией ожидается соответствие модели XY с $\beta \approx 0,23$. Это в значительной степени подтверждается экспериментом, за некоторыми исключениями. Список критических индексов для систем, указанных в таблице 3, показывает, что они группируются вокруг трех значений, одно из которых близко к 0,125, что соответствует модели Изинга, другое близко к значению 0,23 XY-модели, и еще одно близко к значению 0,37 модели Гейзенберга для более толстых пленок. Однако, исходя из ожидаемых значений магнитной анизотропии, возникают некоторые несоответствия. Например, $Fe(110)/Ag(111)$ имеет небольшую анизотропию в плоскости, но показатель β близок к изинговскому. Такая же закономерность наблюдается для $V/Ag(100)$, хотя для этой системы несколько других экспериментов не подтвердили наличие магнитного порядка [60, 150, 151]. Случай $1,7ML Fe/W(110)$, изученный в работе [18], также кажется несовместимым с ожидаемым поведением двумерной XY, но в статье [53] показано, что для этой толщины Fe пленка состоит из островков двойного слоя, выходящих из однослойной пленки, которые ответственны за значительное увеличение магнитной анизотропии, что приводит к изинговскому поведению. Противоположный случай, когда система с перпендикулярной анизотропией дает критический показатель, близкий к значению XY-модели, обнаружен в одном случае для двух образцов $Co/Cu(111)$ [85]. В статье [26] получен критический показатель β для $Fe/GaAs(001)$, близкий к предсказанному значению двумерной XY-модели, даже несмотря на то, что эта система демонстрирует одноосную магнитную анизотропию [27, 63, 100, 164, 169, 170] и от нее следует ожидать поведения, соответствующего модели Изинга. В нескольких сериях исследований рассматривалась зависимость критического индекса от толщины, и поэтому удалось определить точки пересечения двумерного критического поведения Изинга с трехмерным режимом Гейзенберга [84, 85, 107]. Установлено, что толщина перехода составляет около 7 МС для $Ni/Cu(001)$ [84, 85], $Ni/Cu(111)$

[85], $Co_{10}Ni_9/Cu(001)$ [84] и системы $Ni/W(110)$ [107]. Одной из особенностей является зависимость критической температуры от кристаллографической плоскости, связанная с различными координационными числами решетки. Как правило, критическая температура будет увеличиваться с увеличением поверхностного координационного числа. Критическая температура чувствительна к условиям роста и толщине. Слои с одинаковой толщиной, выращенные в разных кристаллографических плоскостях, имеют большие значения критической температуры при изменении плоскости пленки от (100) до (110) и (111). Это можно наблюдать для (ОЦК) 1,6 МС $Fe(100)/W(100)$ и 1,7 МС $Fe(110)/W(110)$; для (ГЦК) 2 МС $Co(100)/Cu(100)$ и 1,7 МС $Co/Cu(111)$; для (ГЦК) $Ni(100)/Cu(100)$ и $Ni(111)/Cu(111)$ [85]. Различия в температуре Кюри для этих примеров составляют порядка 100 К. Другой аспект связан с влиянием на критическую температуру взаимодействия между магнитным слоем и его подложкой или надслоем. Влияние покрывающего слоя на критическую температуру является следствием этого взаимодействия. В таблице 3 значения критической температуры для $1 ML Fe/W(110)$ систематически ниже, чем значение критической температуры для случая, когда пленка покрыта Ag постоянной толщины. Это может быть связано с изменением взаимодействия магнитного момента Fe при контакте с Ag , что приводит к повышению температуры Кюри [89]. Более прямое доказательство предоставлено в статье [127], которые наблюдали повышение критической температуры монослоя $Fe/W(110)$ с 210 К до 296 К при покрытии его слоем Ag . Другим примером являются тонкие пленки Ni и Co , выращенные на $Cu(001)$, где эффект верхнего слоя Cu заключается в снижении температуры Кюри пленок Ni и Co [112, 141, 148, 149]. Покрывающие слои обычно сильно влияют на магнетизм тонких пленок [1617]. Более тонкий эффект покрывающего слоя проявился при наблюдении колебаний критической температуры $Fe/Cu(001)$ [163] и $Co/Cu(001)$ [137] при увеличении покрытия толщины слоя Cu . Эти экспериментальные результаты были подтверждены расчетами из первых принципов [39, 121, 138]. Этот эффект

аналогичен по своей природе колебаниям температуры Кюри Ni в мультислоях $7,3 \text{ \AA} Ni/Au$ в зависимости от толщины прослойки Au [24].

1.5 Выводы

По результатам данной главы можно сделать следующие выводы:

1. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло позволяет адекватно описывать фазовые переходы и критические явления в магнетиках.

2. Антиферромагнитные системы, описываемые моделью Изинга имеют широкое распространение. Антиферромагнитная модель Изинга обладает рядом свойств, отличных от ферромагнитной модели, что позволяет ожидать новых результатов при описании поверхностного критического поведения.

3. Для тонких пленок поверхностный магнетизм отличается от полубесконечных систем со свободной плоской поверхностью. Изменение параметров поверхности тонкой пленки с помощью воздействия на подложку или дополнительного покрытия приводит к смещению температуры фазового перехода и изменениям в поверхностном магнетизме.

4. Магнетизм и антиферромагнетизм тонких эпитаксиальных пленок пленок чувствителен к толщине пленки. Изменение количества моноатомных слоев приводит к изменению температуры Нееля, а также может приводить к изменению режима критического поведения.

5. Эпитаксиальные антиферромагнитные пленки обладают анизотропией намагниченности, перпендикулярной к плоскости подложки и описываются моделью Изинга.

Глава 2. Исследование критического поведения полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга

2.1 Введение

Наличие в системе свободной поверхности может приводить к появлению новых магнитных свойств, отсутствующих в объеме вещества. Свободная поверхность магнитных систем на основе феноменологического подхода была исследована в работах [5, 116]. В этих статьях введено понятие поверхностной магнитной энергии, пропорциональной квадрату параметра порядка. На основе подхода, развитого в работе [5], определен сдвиг температуры Кюри на свободной поверхности по отношению к объему системы для ферромагнитных кристаллов. На основе этой теории в [6] исследована зависимость термодинамических параметров от поверхностной энергии. Явление поверхностного магнетизма состоит в отличии температуры упорядочивания спинов на поверхности от температуры упорядочивания остальных спинов системы.

В работах [31, 44] на основе феноменологического подхода построена фазовая диаграмма для ферромагнитных систем, представленная на рисунке 2.1, содержащая три фазы: неупорядоченная фаза (SD/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза (SO/BD) и поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SO/BO).

Между этими тремя фазами наблюдается три вида фазовых переходов. Переход из SD/BD в SO/BD носит название поверхностного (surface) фазового перехода, из SO/BD в SO/BO – экстраординарного (extraordinary) фазового перехода, из SD/BD в SO/BO – обычного (ordinary) или объемного фазового перехода. Пересечение трех линий фазовых переходов образует трикритическую точку, фазовый переход в которой получил название специального (special) фазового перехода. Названия для переходов были впервые введены в работе [111].

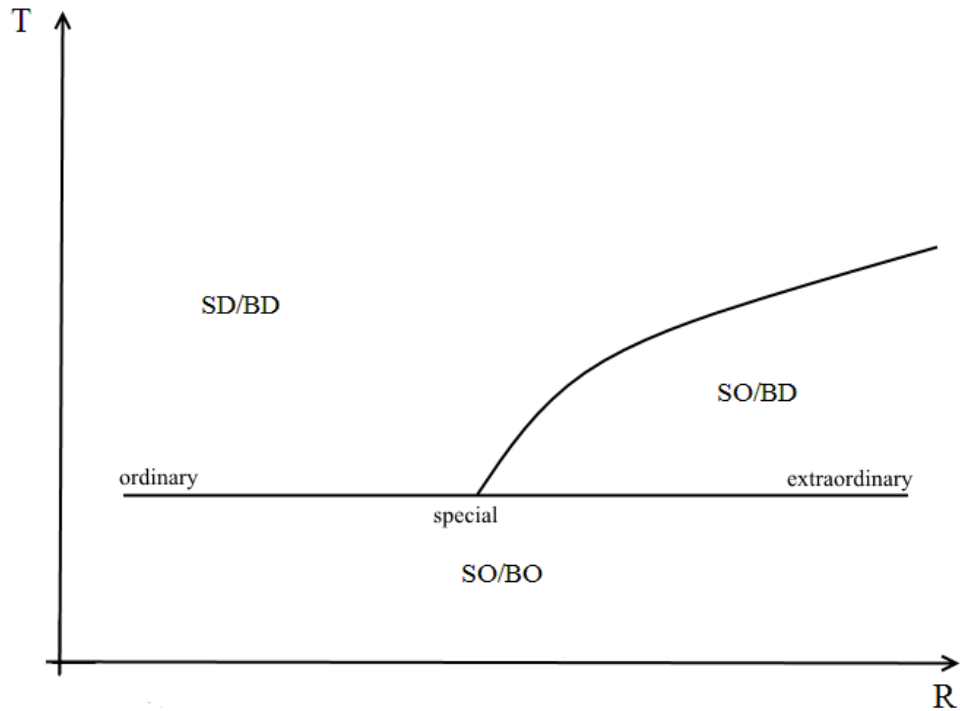


Рисунок 2.1. Фазовая диаграмма ферромагнитных систем, построенная на основе феноменологического подхода.

В рамках теоретико-полевого подхода критические явления вблизи линии поверхностного фазового перехода были исследованы в работах [1, 2, 48]. В этих статьях в двухпетлевом приближении были вычислены поверхностные критические индексы для поверхностного и специального перехода в различных системах.

Отличие температуры поверхностного упорядочивания от объемной наблюдалось в ряде экспериментальных работ. Исследования поликристаллического Gd [133] показали, что упорядочивание на поверхности происходит при температуре на 15 К выше, чем температура Кюри для объема. Аналогичные эффекты поверхностного антиферромагнитного упорядочивания наблюдались Tb [134]. Одновременные исследования поверхности и объема сплава $PdFe$ [113] показали, что температура упорядочения на поверхности ниже, чем в объеме на 2 К. Для поверхности антиферромагнитного макроскопического кристалла Fe_3VO_6 [10] методом мессбауэровской дифракции в геометрии Брегга показано, что упорядочение на поверхности происходит при температурах на

8,5 К ниже температуры Нееля. Исследования поверхностных и объемных магнитных свойств массивных кристаллов Fe_3BO_6 и $FeBO_3$ в работе [8] свидетельствуют, что переход в парамагнитное состояние в поверхностном слое толщиной 300 нм происходит при температурах на 5 К и 1,3 К ниже температуры Нееля для этих кристаллов. Возможность отсутствия порядка на поверхности при переходе основного образца Fe_2O_3 продемонстрирована экспериментально в работе [70]. Авторы объясняют этот эффект изменением расстояния между атомами в приповерхностном слое, который влечет за собой уменьшение значения поверхностного обменного интеграла.

Компьютерное моделирование поверхностных магнитных явлений осуществлялось для ферромагнитных систем в работах [102, 142, 162]. В них было показано, что температура поверхностного фазового перехода превышает температуру объемного перехода при отношении обменных интегралов $J_S/J_B > 1.55$. При значении $J_S/J_B = 1.55$ наблюдается специальный фазовый переход. Для всех видов фазовых переходов получены критические индексы.

В статьях [3, 4] для ферромагнитной модели Изинга методом компьютерного моделирования показано, что при отношении обменных интегралов $J_S/J_B < 1$ температура поверхностного фазового перехода ниже температуры объемного перехода, то есть наблюдается фаза SD/BO. Однако на фазовой диаграмме такой системы присутствует не тетракритическая точка, а две трикритических точки, разделенных областью совпадения температуры поверхностного и объемного перехода (рис.2.2).

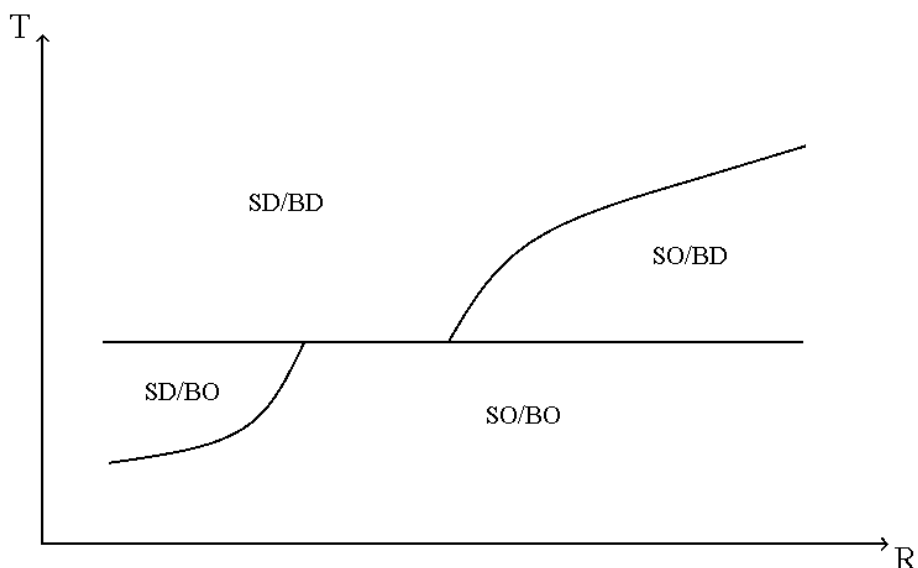


Рисунок 2.2. Фазовая диаграмма для полуограниченных ферромагнитных систем.

При компьютерном моделировании критического поведения, как в полуограниченных системах, так и в пленках предполагается, что обменное взаимодействие между спинами на поверхности по величине отличается от взаимодействия в объеме системы. При этом не учитывается, что отличается от объемного также взаимодействие между поверхностными спинами и первым подповерхностным слоем. Однако учет данного эффекта может существенно сказаться на фазовой диаграмме системы и режиме критического поведения, так как объем системы и поверхность при упорядочении играют друг для друга роль внешнего поля. Величина обменного интеграла между поверхностными спинами и первым подповерхностным слоем определяет интенсивность их взаимодействия. Как показано в работе [25] для полуограниченных антиферромагнетиков учет данного эффекта изменяет фазовую диаграмму системы. Вместо двух трикритических точек на фазовой диаграмме присутствует одна тетракритическая точка.

Целью данной главы является исследование фазовых переходов в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга методом компьютерного моделирования при различных значениях поверхностной энергии.

2.2 Описание модели

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

$$H = J_B \sum_B S_i S_j + J_S \sum_S S_i S_j + J_{BS} \sum_{BS} S_i S_j + \mu_B h_0 \sum S_i \quad (2.1)$$

где S_i – значения спина в i -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$), μ_B – магнетон Бора, h_0 – напряженность внешнего магнитного поля. Во всех трех слагаемых суммирование осуществляется только по парам ближайших соседей. В первом слагаемом учитываются только спины, не расположенные на поверхности. Во втором слагаемом суммирование выполняется только по спинам, расположенным на свободной поверхности. В третьем слагаемом в каждой паре один спин расположен на поверхности, а второй в ближайшем подповерхностном слое.

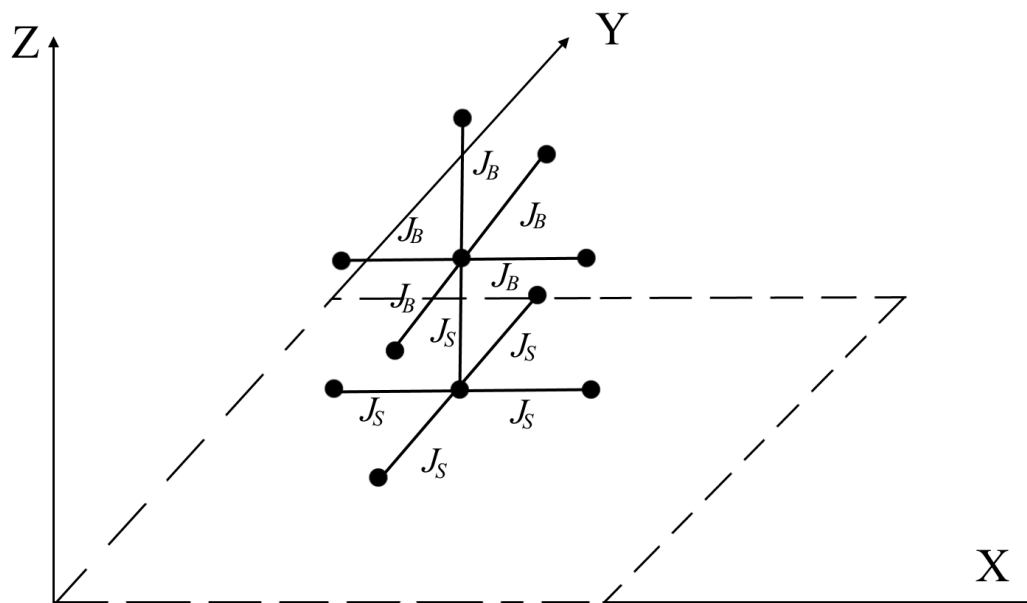


Рисунок 2.3. Распределение обменных интегралов в поверхностном и приповерхностном слоях.

При компьютерном моделировании удобнее работать с безразмерными относительными величинами:

$$R = \frac{J_S}{J_B} \quad (2.2)$$

В этом случае Гамильтониан примет вид:

$$\frac{H}{J_B} = \sum_B S_i S_j + R \sum_S S_i S_j + R \sum_{BS} S_i S_j + h \sum S_i, \quad (2.3)$$

где $h = \frac{\mu_B h_0}{J_B}$.

Вместо температуры t удобнее рассматривать безразмерную величину:

$$T = \frac{k_B t}{J_B}, \quad (2.4)$$

где k_B – постоянная Больцмана.

В силу поверхностных явлений обменный интеграл на поверхности J_S для большинства систем отличается от обменного интеграла J_B для спинов, расположенных в основном объеме системы. Причем J_S может быть как больше, так и меньше J_B , что приводит к различным значениям поверхностной энергии. Различие значений поверхностного и объемного обменных интегралов было вычислено из первых принципов в работах [108, 143], и подтверждено экспериментально [36, 144]. В статье [28] на основе расчетов из первых принципов показано, что для FeO поверхностная энергия линейно зависит от химического потенциала. В работе [108] расчеты из первых принципов для Gd показали, что расстояние между атомами в объеме кристалла равно 3.52 Å, тогда как на поверхности 3.64 Å, что приводит к отличию в значениях обменных интегралов, соответственно $J_S = 1.25$ и $J_B = 1.51$, и, следовательно, их отношение $R = J_S/J_B = 0.83$.

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 $z = L$. (рис. 2.4) Для определения температуры фазового перехода использовалась теория конечноразмерного скейлинга.

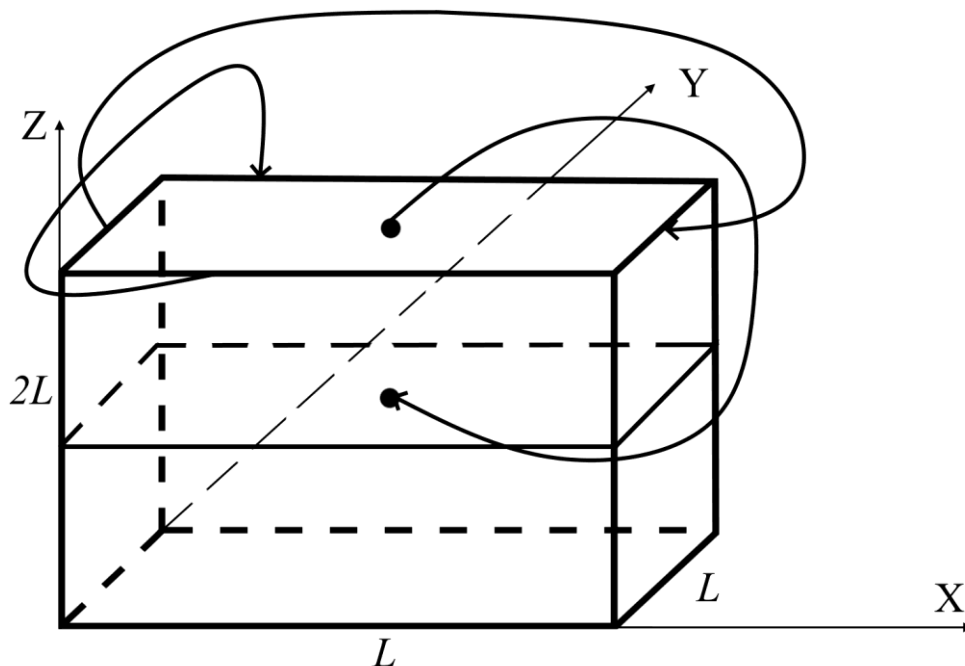


Рисунок 2.4. Циклические граничные условия.

Для исследования антиферромагнитного упорядочивания введем два параметра порядка. Первый параметр порядка m будет определять антиферромагнитный порядок в основном объеме системы, и вычисляться, как шахматная намагниченность. Значение m равно разности магнитных моментов двух подрешеток. Для исследования поверхностного антиферромагнетизма введем параметр порядка m_s , который вычисляется как шахматная намагниченность спинов, расположенных на свободной поверхности.

Критическая температура перехода определялась с помощью объемных и поверхностных кумулянтов Биндера четвертого порядка:

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad U_s = 1 - \frac{\langle m_s^4 \rangle}{3\langle m_s^2 \rangle^2} \quad (2.5)$$

Угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

Температуры фазовых переходов определялись по положению точки пересечения кумулянтов для систем с различными размерами L . Для нахождения

объемной критической температуры T_N использовались куммулянты U , для определения температуры поверхностного фазового перехода T_S исследовалось поведение куммулянтов U_S .

Для наблюдения за поведением восприимчивости в объеме системы и на ее поверхности использовались флуктуационные соотношения:

$$\chi = NK(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad \chi_S = SK(\langle m_S^2 \rangle - \langle m_S \rangle^2) \quad (2.6)$$

$K = |J_B| / k_B T$, k_B – постоянная Больцмана, $N = 2L^3$ – число узлов в системе, $S = L^2$ – число узлов на поверхности. Угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

Определение критических индексов основывается на теории конечноразмерного скейлинга [142]. Восприимчивости в критической области удовлетворяют соотношению:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad \chi_S \sim L^{\gamma_S/\nu_S} \quad (2.7)$$

Из данного соотношения может быть найдено отношение критических индексов γ_1/ν_1 и γ_2/ν_2 . Критические индексы ν и ν_S могут быть вычислены из соотношений:

$$\frac{dU}{dT} \sim L^{-1/\nu}, \quad \frac{dU_S}{dT} \sim L^{-1/\nu_S} \quad (2.8)$$

Остальные критические индексы могут быть найдены из скейлинговых соотношений:

$$\eta_S = 2 - \frac{\gamma_S}{\beta_S}, \quad \beta_S = \frac{\nu_S}{2}(D - 2 + \eta_S), \\ \alpha_S = 2 - D\nu_S \quad (2.9)$$

2.3 Фазовая диаграмма системы

Компьютерное моделирование проводилось для систем с линейным размером от $L = 20$ до $L = 48$ с шагом $\Delta L = 4$. Количество шагов Монте-Карло на спин 6×10^5 . Отношение обменных интегралов изменялось от $R = 0.5$ до $R = 2.0$.

На основе компьютерного эксперимента были получены зависимости температуры Нееля T_N объемного перехода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние и температуры фазового перехода в поверхностном слое T_S .

На рисунках 2.5 – 2.15 представлены графики зависимости объемных и поверхностных кумулянтов Биндера от температуры для отношения обменных интегралов от $R = 1.0$ до $R = 2.0$.

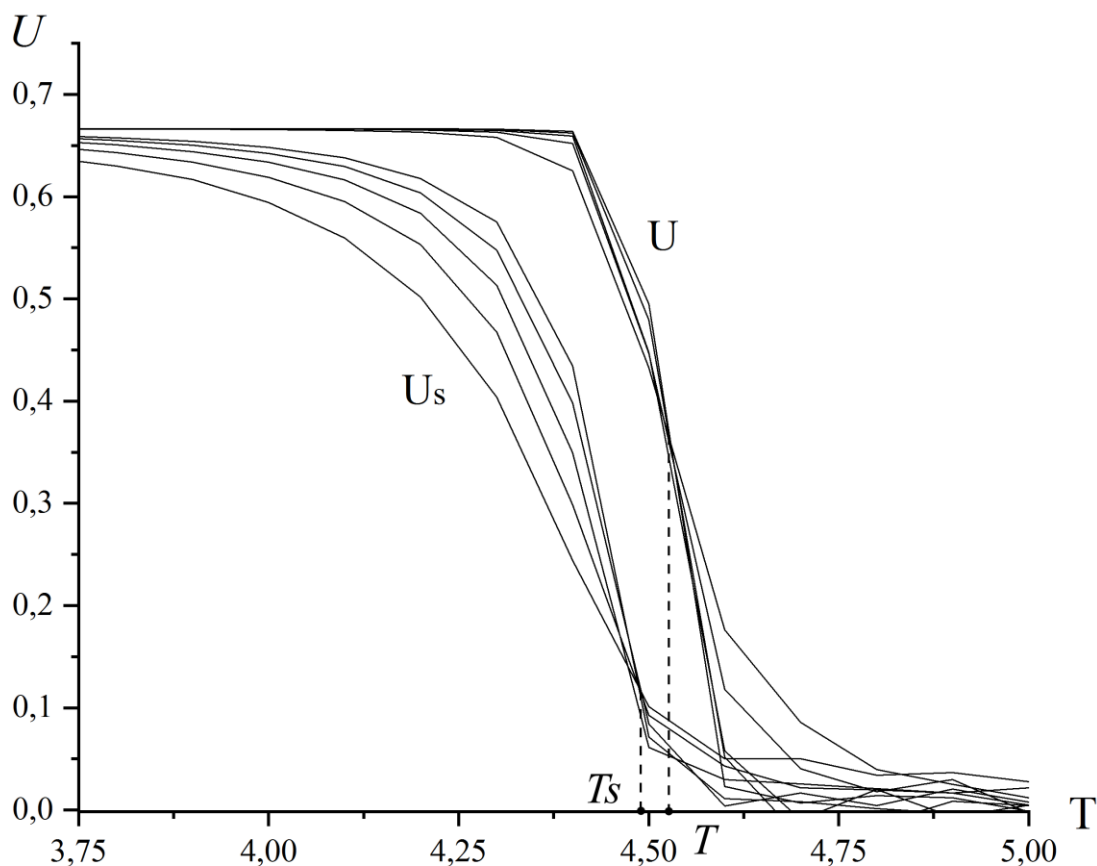


Рисунок 2.5. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.0$.

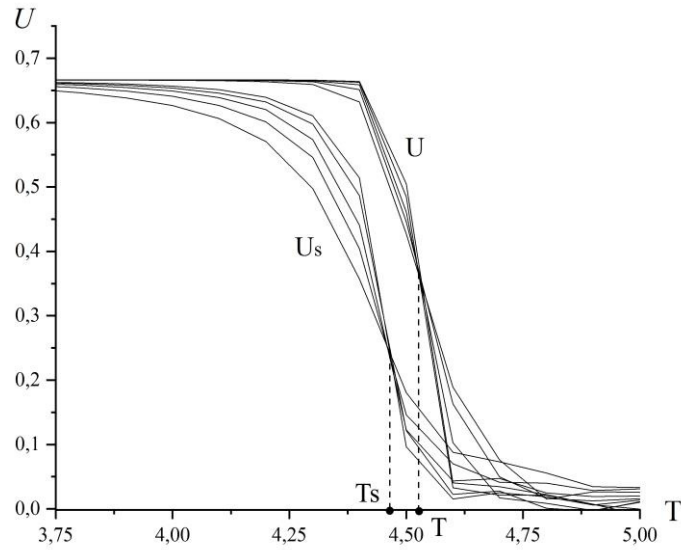


Рисунок 2.6. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.1$.

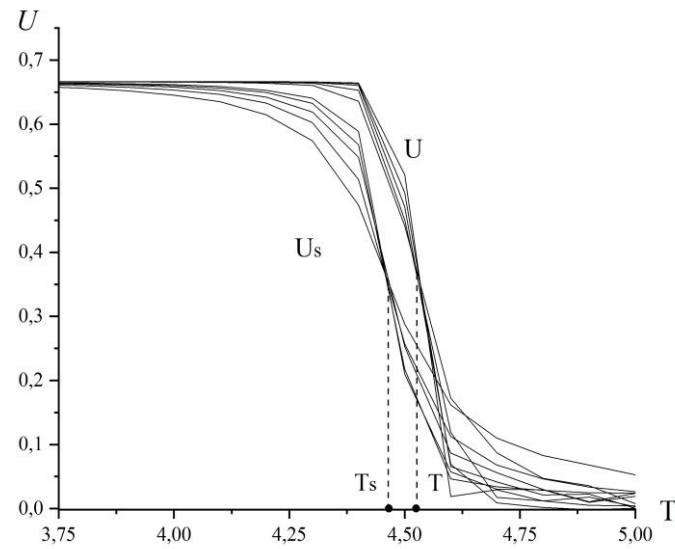


Рисунок 2.7. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.2$.

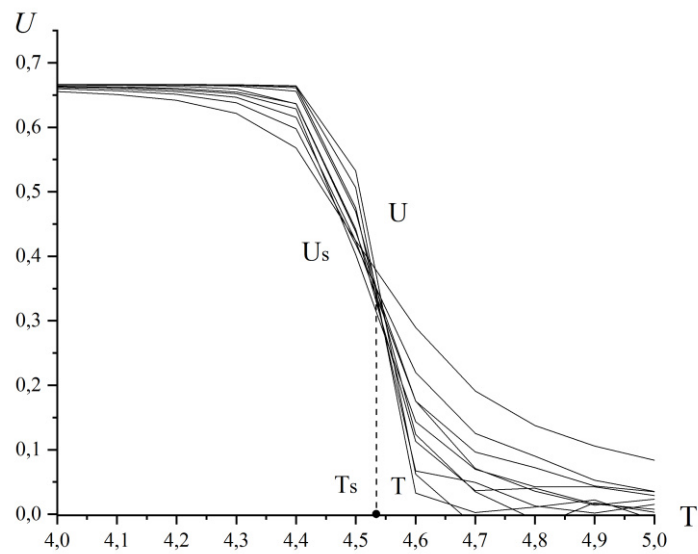


Рисунок 2.8. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.3$.

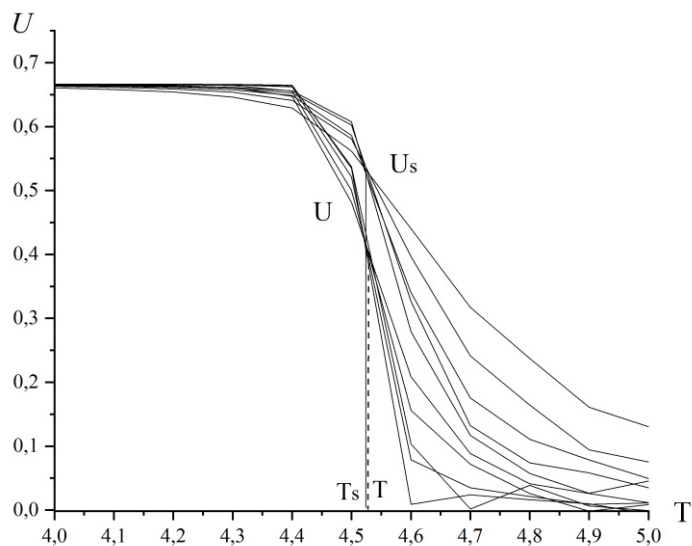


Рисунок 2.9. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.4$.

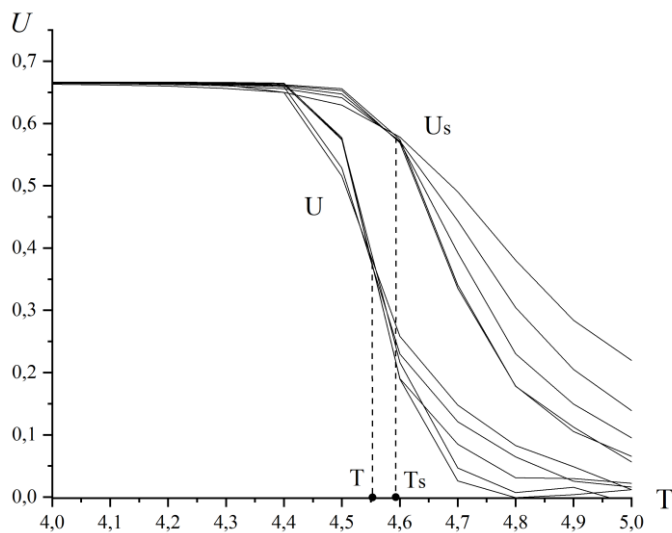
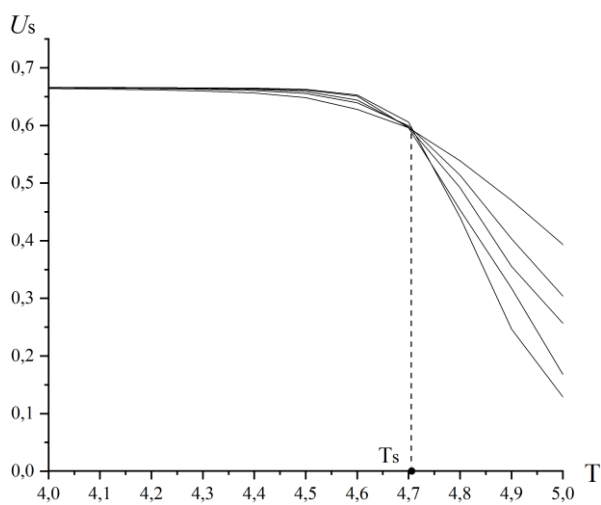
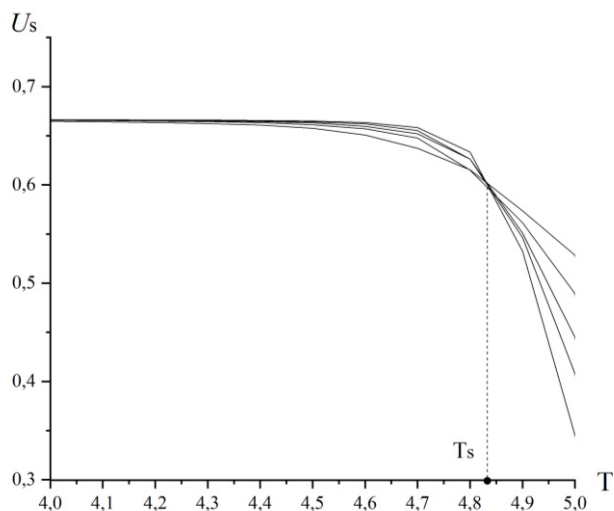


Рисунок 2.10. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для случая $R = 1.5$.



а)



б)

Рисунок 2.11. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры: а) $R = 1.6$, б) $R = 1.7$.

Фазовая диаграмма системы представлена на рисунке 2.12.

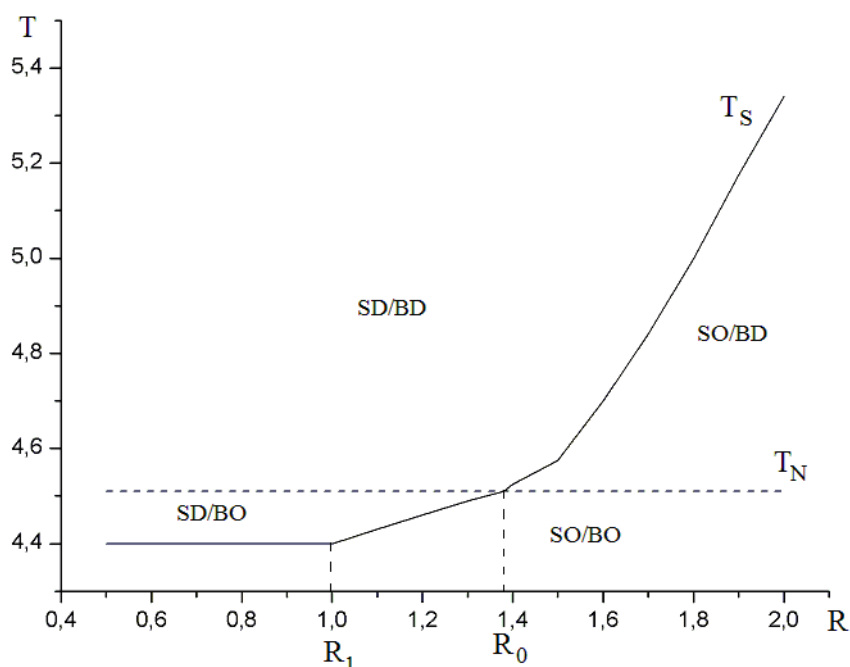


Рисунок 2.12. Фазовая диаграмма системы. Пунктирной линией показана зависимость температуры объемного фазового перехода T_N от отношения обменных интегралов R , сплошной линией изображена зависимость температуры поверхностного фазового перехода T_S от R .

Температура объемного фазового перехода не зависит от R и является постоянной, совпадающей с температурой Нееля для неограниченной трехмерной антиферромагнитной модели Изинга $T_N = 4.51$. Данный результат является ожидаемым. Величина R определяет взаимодействие между спинами в одном поверхностном слое и оказывает пренебрежимо малое влияние на бесконечную систему. Напротив, температура поверхностного фазового перехода T_S растет с увеличением R . Этот результат можно объяснить ростом энергии теплового движения, необходимой для переворота одного спина, с увеличением R . Нелинейный характер зависимости T_S от R объясняется взаимодействием поверхностного слоя со слоем спинов, следующим за поверхностным.

Как видно из фазовой диаграммы линии объемного и поверхностного фазовых переходов пересекаются в одной точке $R_0 = 1.38$, образуя тетракритическую точку. Таким образом система может находиться в четырех фазах: SD/BD, SO/BO, SO/BD и SD/BO.

Следует отметить, что полученная фазовая диаграмма для трехмерной полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга существенно отличается от аналогичной фазовой диаграммы для ферромагнитной модели Изинга, приведенной на рисунке 2.1. Для ферромагнитной системы существует достаточно большой отрезок значений R , на котором температуры объемного и поверхностного переходов совпадают. Для антиферромагнитной системы совпадение температур наблюдается всего в одной точке. Это качественное различие можно объяснить степенью влияния всей системы на поверхностный слой. В ферромагнитных системах, образующиеся в глубине образца домены создают магнитное поле, существенно влияющее на упорядочение спинов на поверхности. Таким образом, влияние на поверхностный магнитный момент оказывает вся система. В антиферромагнитных системах возникающие в образце домены обладают нулевым магнитным моментом и не создают магнитное поле. Следовательно, упорядочение, возникающее в глубине образца, может повлиять на поверхностный порядок спинов только через слой, расположенный непосредственно под поверхностью, то есть при выходе домена на поверхность.

Поведение температуры поверхностного перехода 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 $R < R_0$ поверхностная температура при уменьшении R сначала монотонно убывает, но, начиная с $R = R_1$, стабилизируется на значении $T_S = 4.40$ и далее остается неизменной. В нашем компьютерном эксперименте было получено $R_1 = 1.0$. Такое различие в поведении поверхностной критической температуры также 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 же поверхностных критических индексов отличаются как от объемных критических индексов, так и от критических индексов двумерной антиферромагнитной модели Изинга. Отличие от объемных индексов объясняется двумерностью поверхностного слоя. Отличие от чистой двумерной модели можно объяснить влиянием основной системы на процессы на поверхности. Графики зависимости критических индексов от отношения обменных интегралов, представлены на рисунках 2.13 – 2.18 соответственно.

Как видно из рисунков поверхностные критические индексы с ростом отношения обменных интегралов R приближаются к значениям критических индексов двумерной модели Изинга. Объяснение этого факта состоит в том, что при увеличении R растет разность температур поверхностного и объемного переходов. Следовательно, объемное упорядочение меньше сказывается на поверхностном порядке. Наоборот, при уменьшении R объемное упорядочение оказывает все большее влияние на поверхностные спины и, как следствие, значения критических индексов больше отличаются от показателей двумерной модели Изинга.

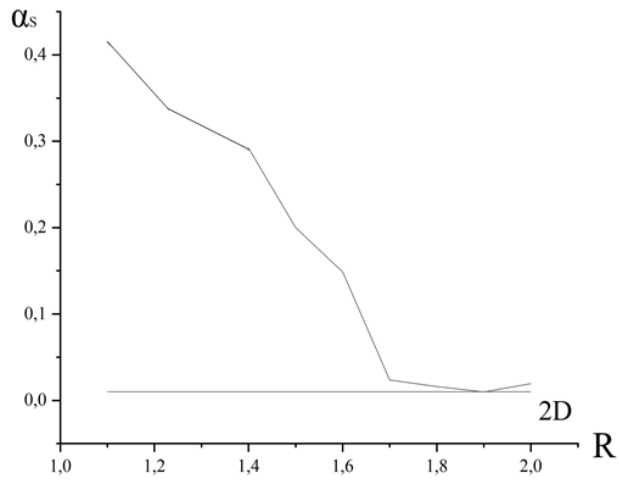


Рисунок 2.13. Зависимость критического индекса α_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса α для двумерной модели Изинга.

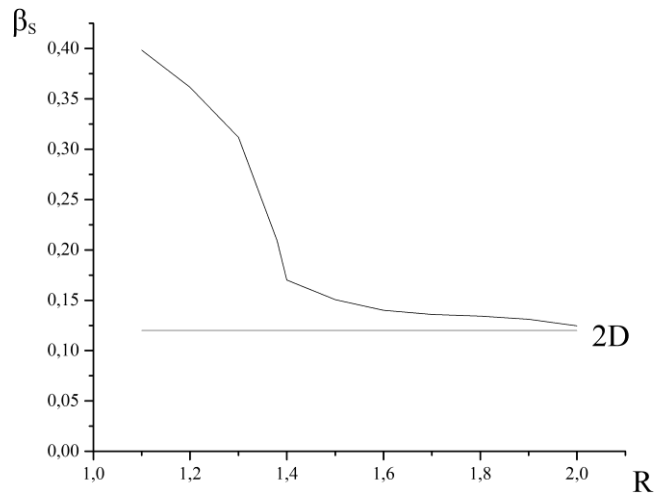


Рисунок 2.14. Зависимость критического индекса β_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса β для двумерной модели Изинга.

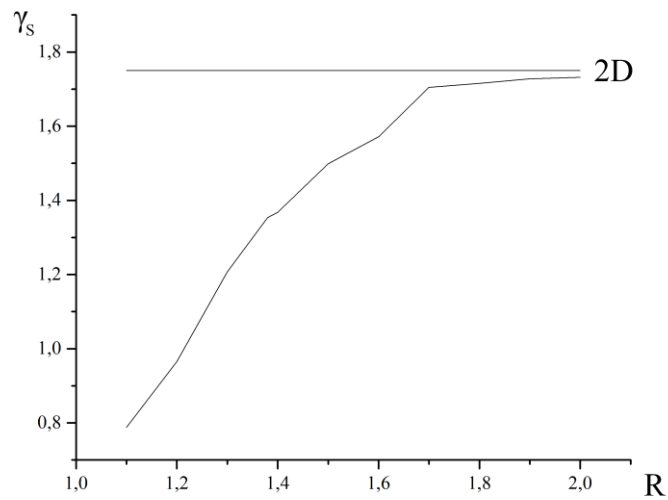


Рисунок 2.15. Зависимость критического индекса γ_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса γ для двумерной модели Изинга.

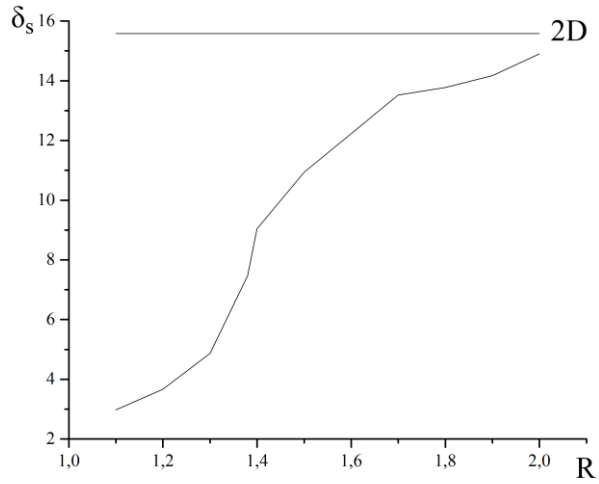


Рисунок 2.16. Зависимость критического индекса δ_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса δ для двумерной модели Изинга.

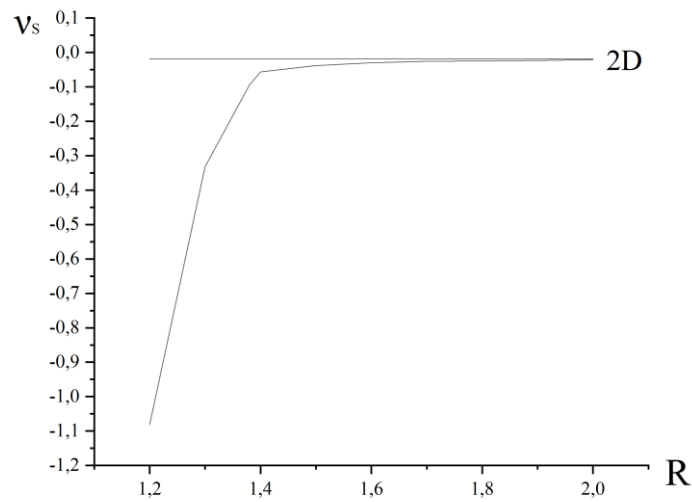


Рисунок 2.17. Зависимость критического индекса ν_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса ν для двумерной модели Изинга.

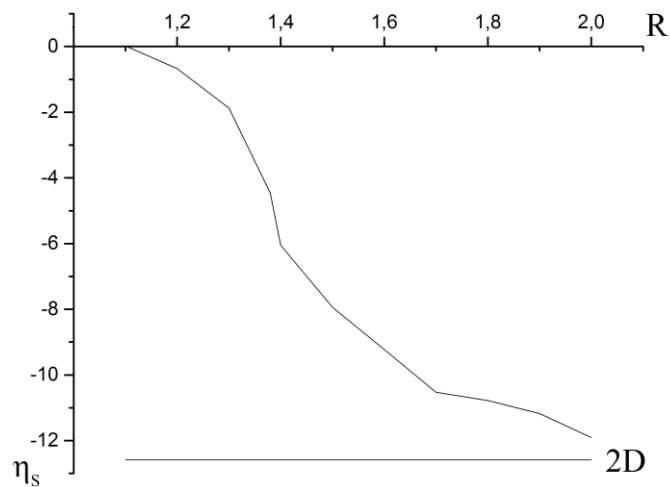


Рисунок 2.18. Зависимость критического индекса η_s от R . Прямой линией показано значение критического индекса η для двумерной модели Изинга.

2.4 Поведение системы при $R < R_1$

Отдельно необходимо рассмотреть поведение системы при отношении обменных интегралов $R < R_1$. Как уже было сказано выше, малая величина межспинового взаимодействия на поверхности системы приводит к понижению температуры фазового перехода. При этом домены, возникающие в глубине образца, увеличиваясь в размерах, выходят на поверхность и влияют на упорядочение, расположенных там спинов. В результате конкуренции этих двух процессов поверхностный фазовый переход характеризуется необычным поведением термодинамических функций. Прежде всего, необходимо отметить, что в данной области значений R поверхностный переход из парамагнитной в антиферромагнитную фазу, по-прежнему, носит непрерывный характер. Поведение поверхностного и объемного параметров порядка при $R < R_1$ представлено на рисунках 2.19 – 2.24. Сплошной линией показано поведение объемной шахматной намагниченности, пунктирной – поверхностной шахматной намагниченности.

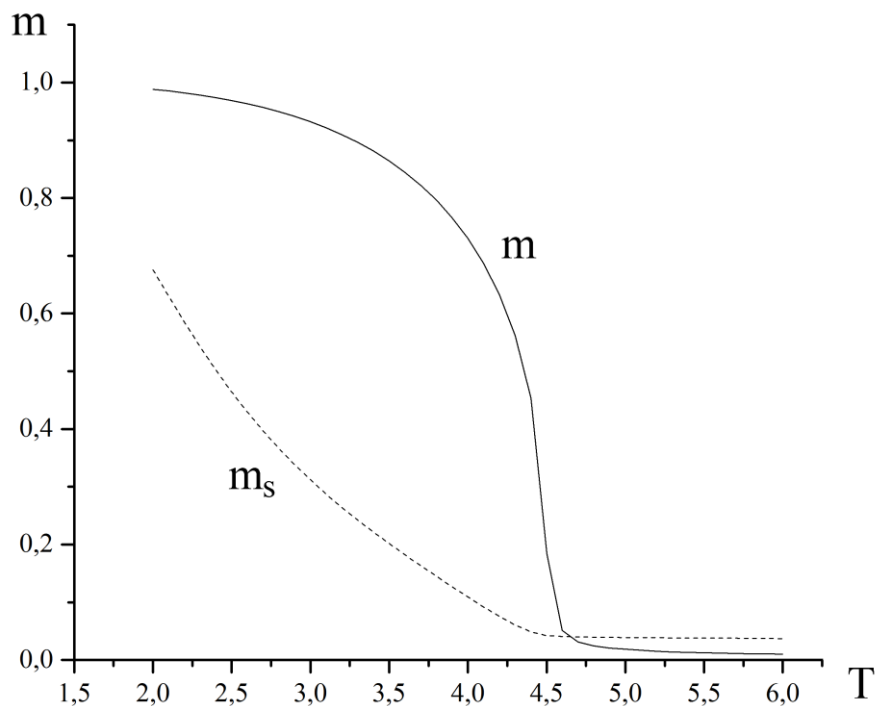


Рисунок 2.19. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 0.5$.

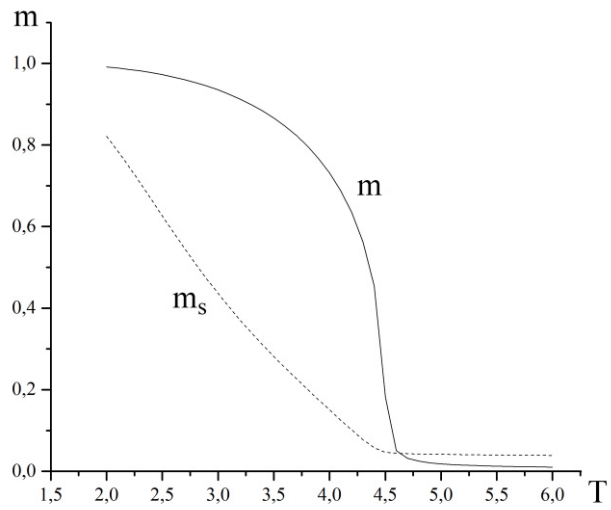


Рисунок 2.20. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 0.6$.

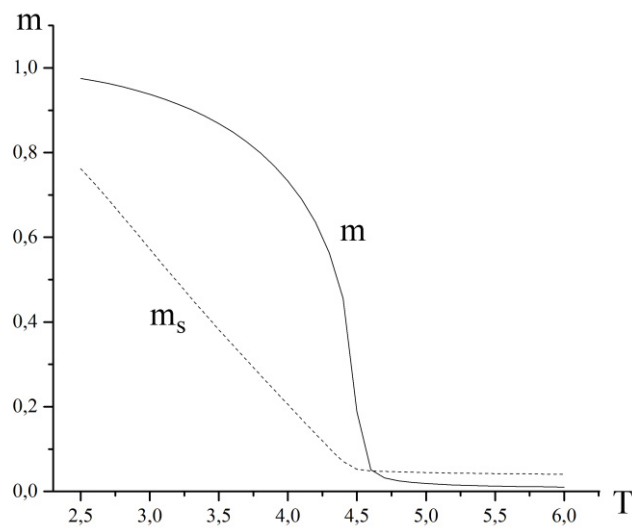


Рисунок 2.21. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 0.7$.

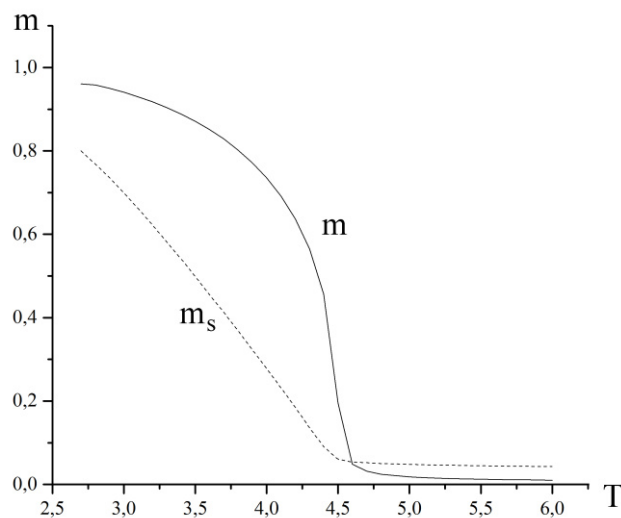


Рисунок 2.22. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 0.8$.

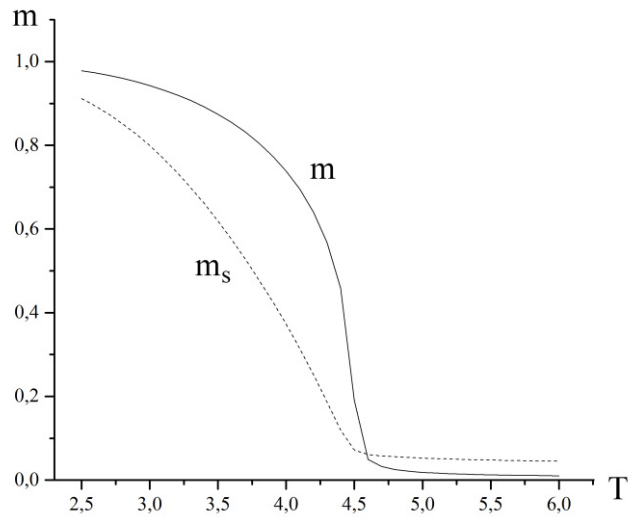


Рисунок 2.23. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 0.9$.

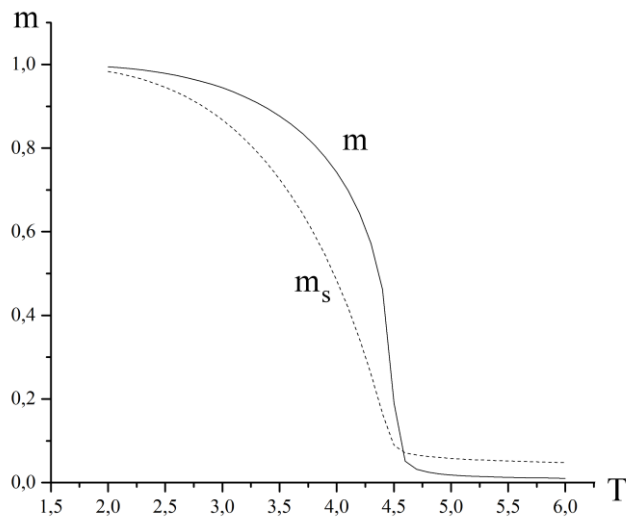
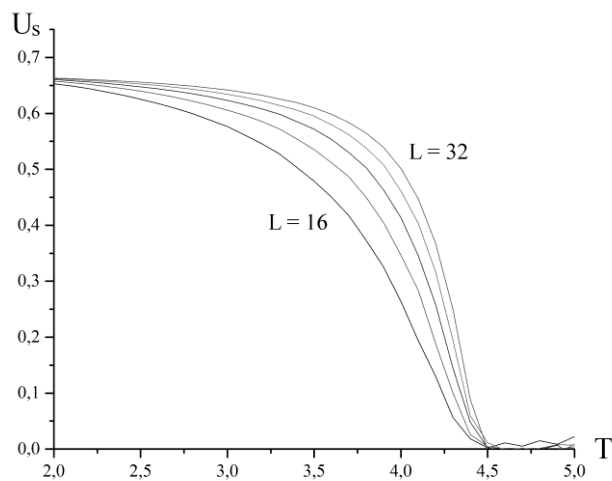
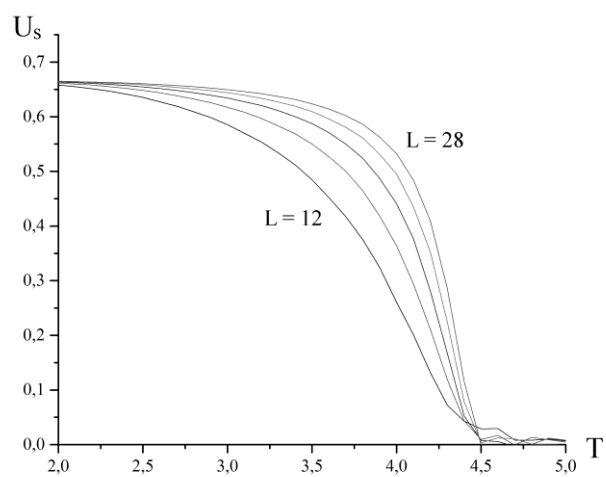


Рисунок 2.24. Зависимость поверхностной и объемной шахматной намагниченности от температуры при $R = 1.0$.

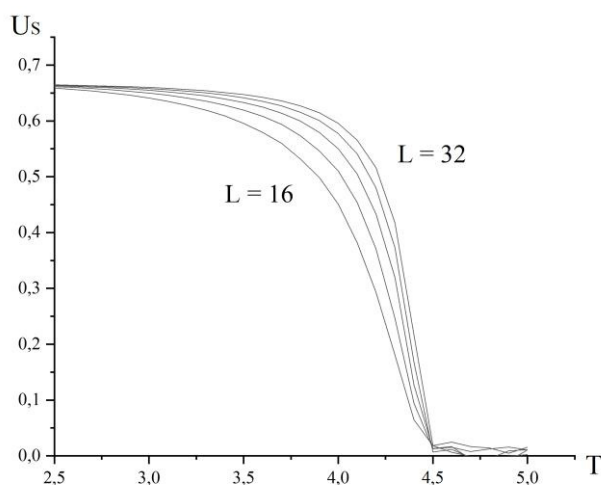
Однако другие характерные черты фазового перехода второго рода не наблюдаются. Прежде всего, отсутствует пересечение кумулянтов Биндера в точке фазового перехода (рисунок 2.25), присутствующее для всех систем, испытывающих фазовый переход второго рода. Кумулянты пересекаются только для своих предельных значений $U = 2/3$ и $U = 0$. Данное поведение кумулянтов делает невозможным их использование для определения температуры фазового перехода.



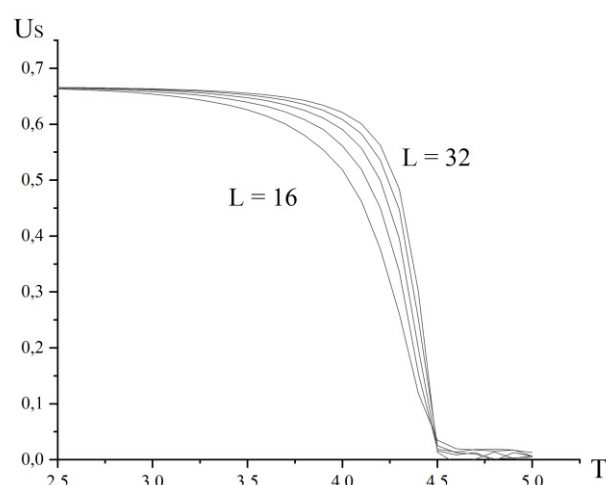
а)



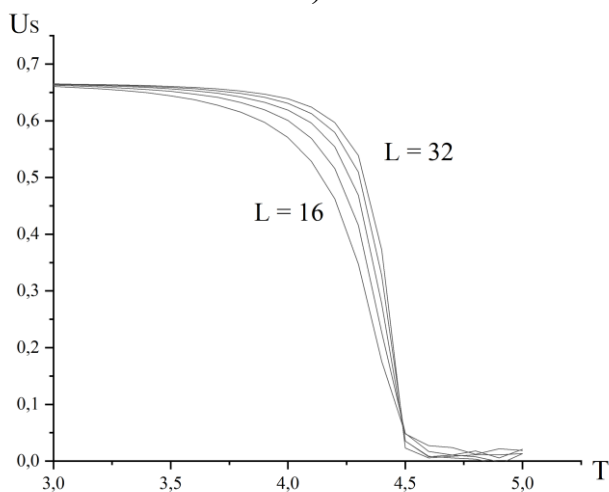
б)



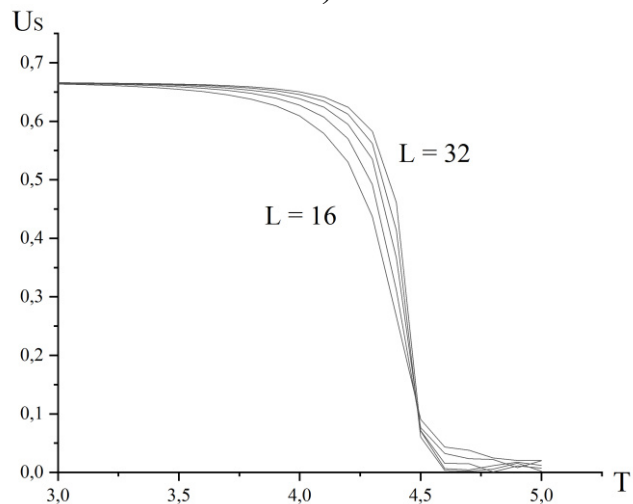
в)



г)



д)



е)

Рисунок 2.25. Зависимость поверхностных кумулянтов Биндера от температуры для систем различного размера: а) $R = 0.5$, б) $R = 0.6$, в) $R = 0.7$, г) $R = 0.8$, д) $R = 0.9$, е) $R = 1.0$.

Также нехарактерным является поведение восприимчивости. Для фазовых переходов второго рода при температуре Нееля происходит скачкообразное изменение восприимчивости. Более того, в узкой области вблизи температуры фазового перехода должно наблюдаться сингулярное поведение восприимчивости, которое может быть аппроксимировано степенным законом. Для систем конечного размера на графике зависимости восприимчивости от температуры наблюдается характерный пик, высота которого увеличивается с ростом линейного размера системы. При поверхностном переходе в антиферромагнитной модели Изинга с отношением обменных интегралов $R < R_1$ скачок в поведении восприимчивости отсутствует. Признаки сингулярного поведения также отсутствуют. График восприимчивости слабо зависит от линейных размеров системы. На рисунках 2.26 – 2.31 представлена зависимость поверхностной восприимчивости от температуры для случая $R < R_1$, на рисунке 2.32 показано поведение поверхностной восприимчивости для $R = 1.3$, типичное для фазового перехода второго рода.

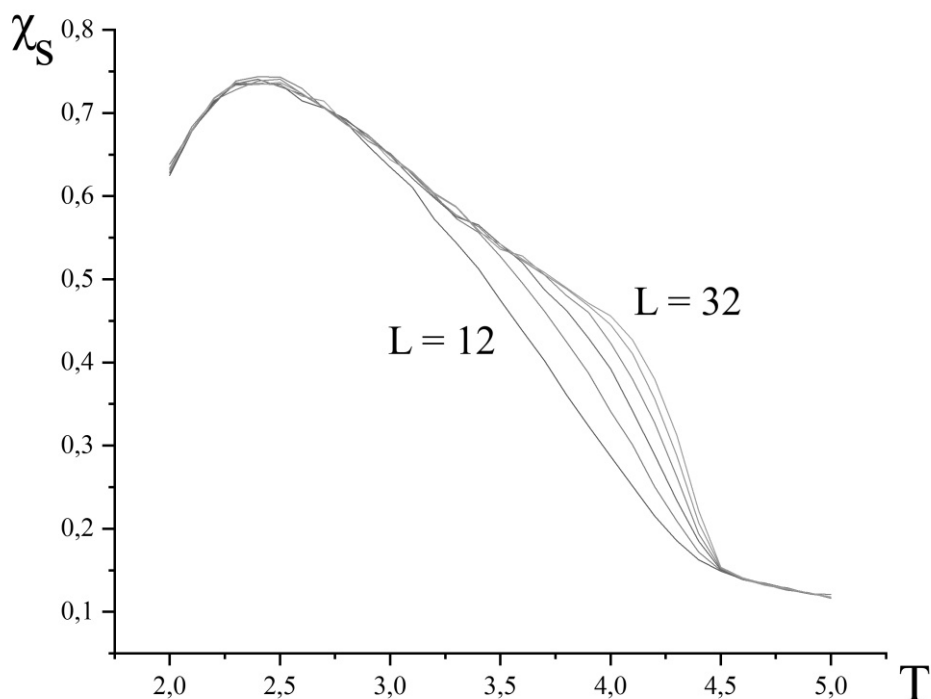


Рисунок 2.26. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_S от температуры для систем различного размера при $R = 0.5$.

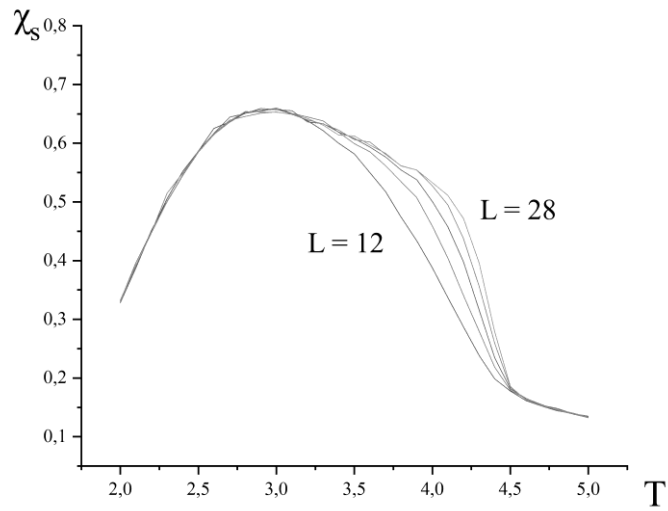


Рисунок 2.27. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 0.6$.

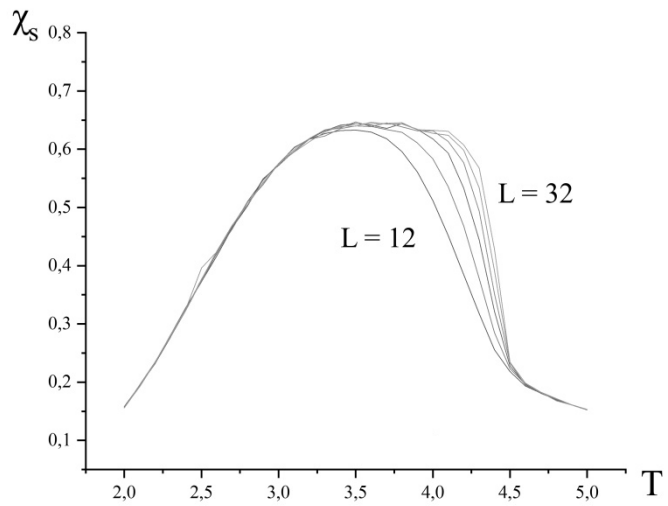


Рисунок 2.28. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 0.7$.

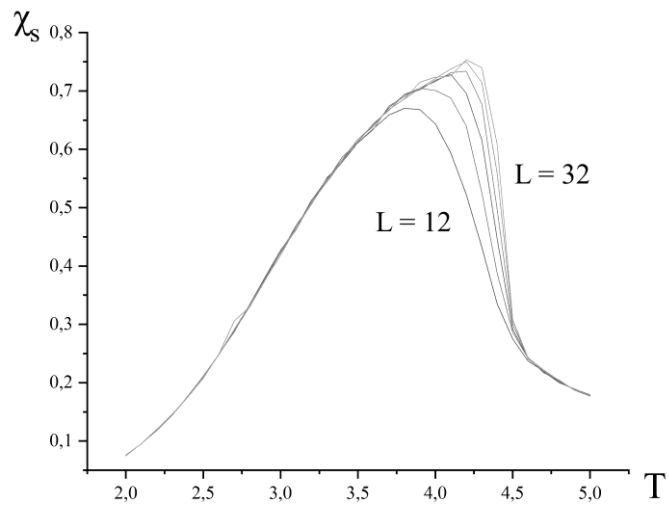


Рисунок 2.29. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 0.8$.

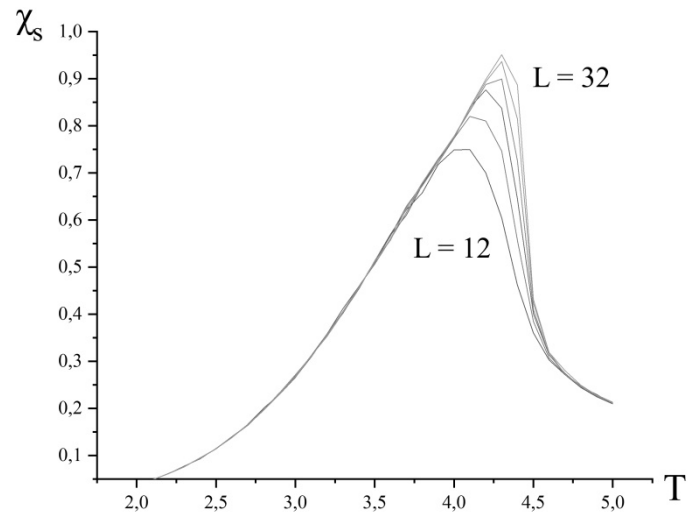


Рисунок 2.30. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 0.9$.

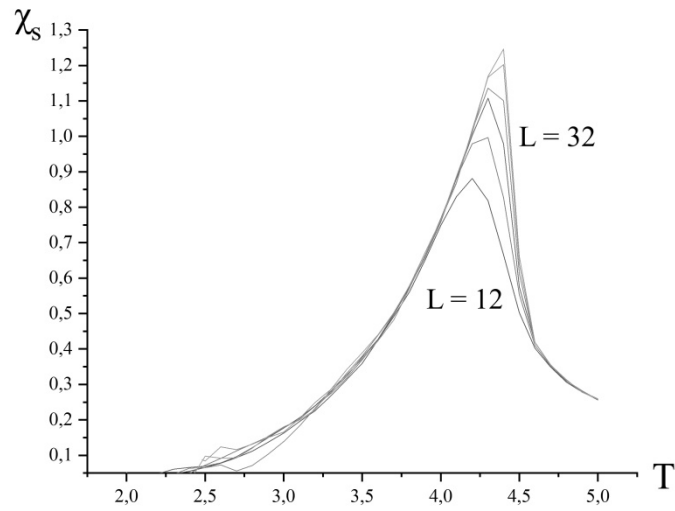


Рисунок 2.31. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 1.0$.

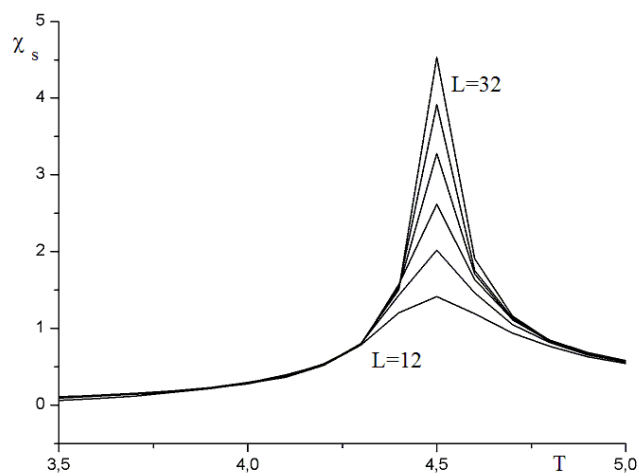


Рисунок 2.32. Зависимость поверхностной восприимчивости χ_s от температуры для систем различного размера при $R = 1.3$.

Рассмотрим поведение второй производной поверхностного параметра порядка по индукции магнитного поля, то есть первой производной от поверхностной восприимчивости.

Выведем соответствующее соотношение. Пусть намагниченность в узле p имеет значение m_p . Тогда для энергии спина в узле p можем записать

$$E_p = E_{p,0} - \mu_B h_p m_p \quad (2.10)$$

где $E_{p,0}$ – собственная энергия в узле p , а h_p – внешнее для данного узла магнитное поле, создаваемое другими спинами, μ_B – магнетон Бора. Используя микроканоническое распределение мы можем написать распределение вероятности:

$$W_p = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) \quad (2.11)$$

Статистическая сумма

$$Z = \sum_{p=1}^N \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) \quad (2.12)$$

N – общее количество узлов на поверхности.

Поверхностная намагниченность системы:

$$\langle m_S \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^N m_p \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) \quad (2.13)$$

Магнитная восприимчивость системы:

$$\begin{aligned} \chi_S &= N \frac{\partial \langle m_S \rangle}{\partial h} = N \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{Z} \sum_{p=1}^N m_p \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) \right) = \\ &= -\frac{N}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial h} \sum_{p=1}^N m_p \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) + \frac{N}{Z} \sum_{p=1}^N m_p \left(-\frac{1}{k_B T} \right) \frac{\partial E_p}{\partial h} \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right), \\ &\quad \frac{\partial E_p}{\partial h} = -m_p, \\ \frac{\partial Z}{\partial h} &= -\frac{1}{k_B T} \sum_{p=1}^N \frac{\partial E_p}{\partial h} \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) = \frac{1}{k_B T} \sum_{p=1}^N m_p \exp\left(\frac{-E_p}{k_B T}\right) = \frac{Z}{k_B T} \langle m_S \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\chi_S &= -\frac{N}{Z^2} \cdot \frac{Z^2}{k_B T} \langle m \rangle^2 + \frac{N}{Z} \cdot \frac{Z}{k_B T} \langle m^2 \rangle, \\ \chi_S &= \frac{S}{k_B T} \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right)\end{aligned}\quad (2.14)$$

Найдем производную от восприимчивости:

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \frac{\partial \chi_S}{\partial h} &= \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{k_B T} \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right) \right) = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial \langle m^2 \rangle}{\partial h} - 2 \langle m \rangle \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial h} \right) = \\ &= \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial \langle m^2 \rangle}{\partial h} - 2 \langle m \rangle \chi_S \right) = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial \langle m^2 \rangle}{\partial h} - \frac{2 \langle m \rangle}{k_B T} \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right) \right), \\ \frac{\partial \langle m^2 \rangle}{\partial h} &= \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{Z} \sum_{p=1}^N m_p^2 \exp \left(\frac{-E_p}{k_B T} \right) \right) = \\ &= -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial h} \sum_{p=1}^N m_p^2 \exp \left(\frac{-E_p}{k_B T} \right) + \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^N m_p^2 \left(-\frac{1}{k_B T} \right) \frac{\partial E_p}{\partial h} \exp \left(\frac{-E_p}{k_B T} \right) = \\ &= -\frac{1}{k_B T} \langle m \rangle \langle m^2 \rangle + \frac{1}{Z} \left(\frac{1}{k_B T} \right) \sum_{p=1}^N m_p^3 \exp \left(\frac{-E_p}{k_B T} \right) = \frac{1}{k_B T} \left(-\langle m \rangle \langle m^2 \rangle + \langle m^3 \rangle \right), \\ \frac{\partial^2 m_S}{\partial h^2} &= \frac{\partial \chi_S}{\partial h} = \frac{N}{(k_B T)^2} \left(\langle m_S^3 \rangle - 3 \langle m_S^2 \rangle \langle m_S \rangle + 2 \langle m_S \rangle^3 \right)\end{aligned}\quad (2.15)$$

Поведение производной от восприимчивости представлено на рисунках 2.33 – 2.38.

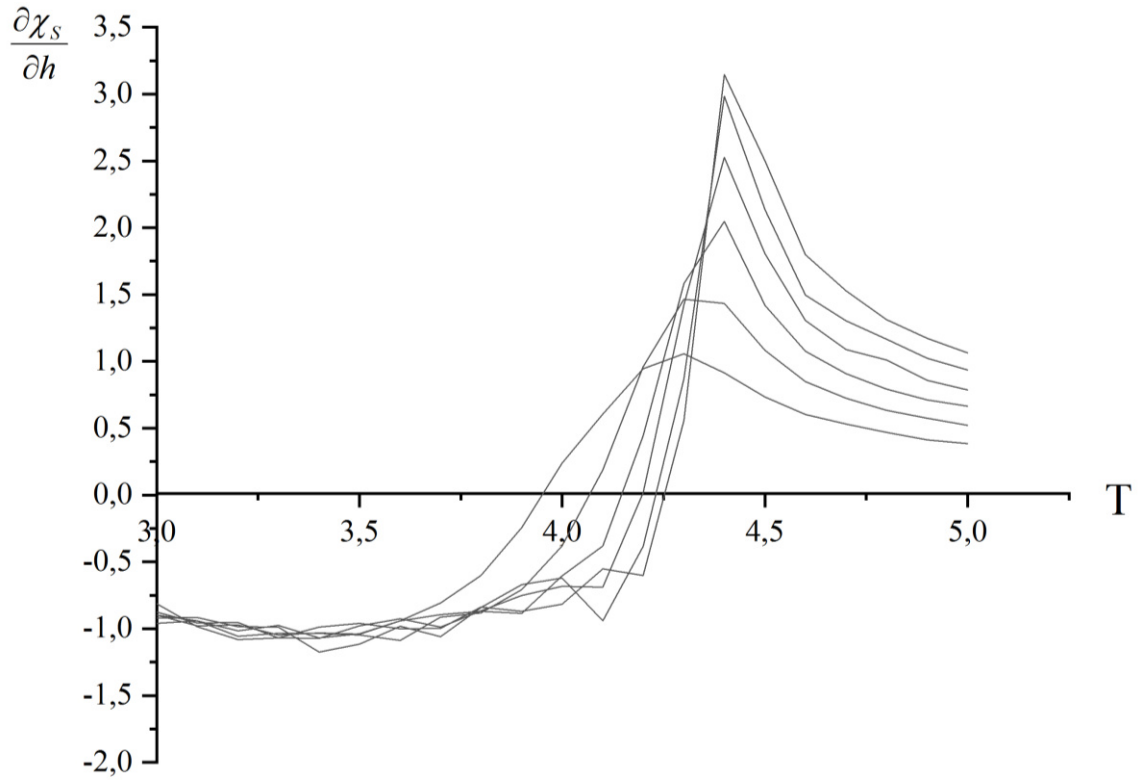


Рисунок 2.33. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 0.5$.

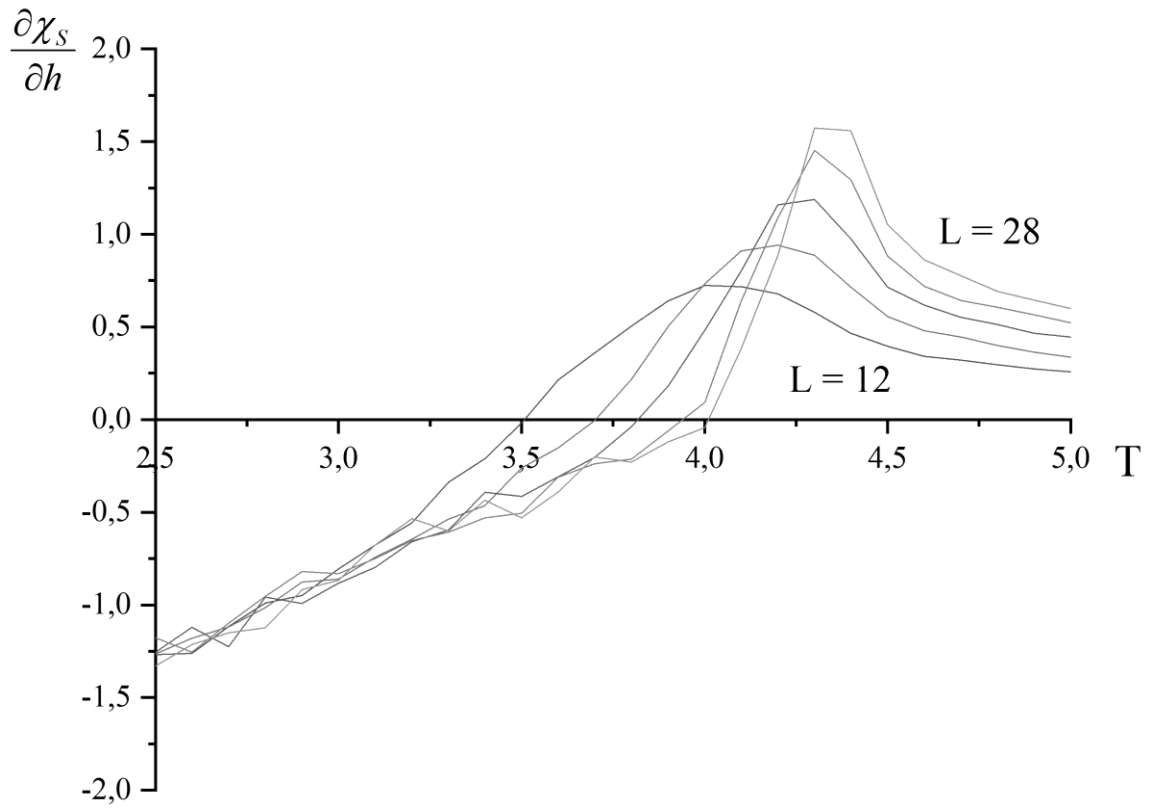


Рисунок 2.34. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 0.6$.

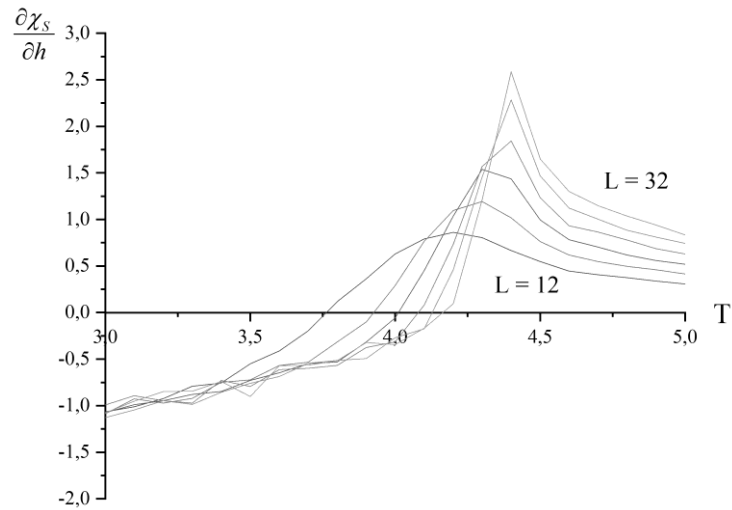


Рисунок 2.35. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 0.7$.

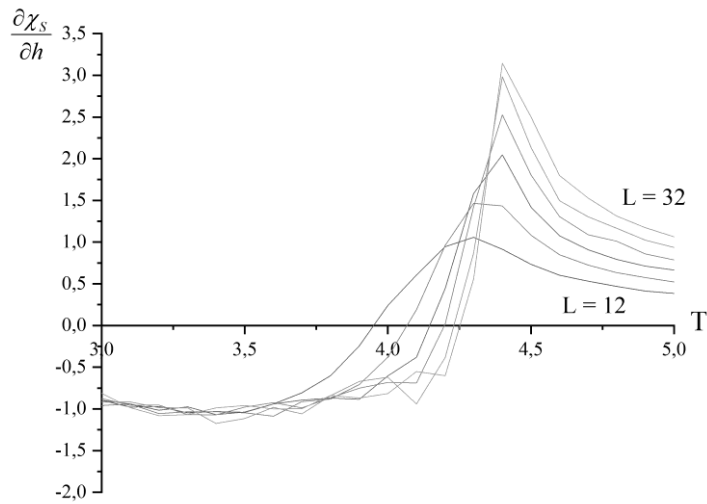


Рисунок 2.36. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 0.8$.

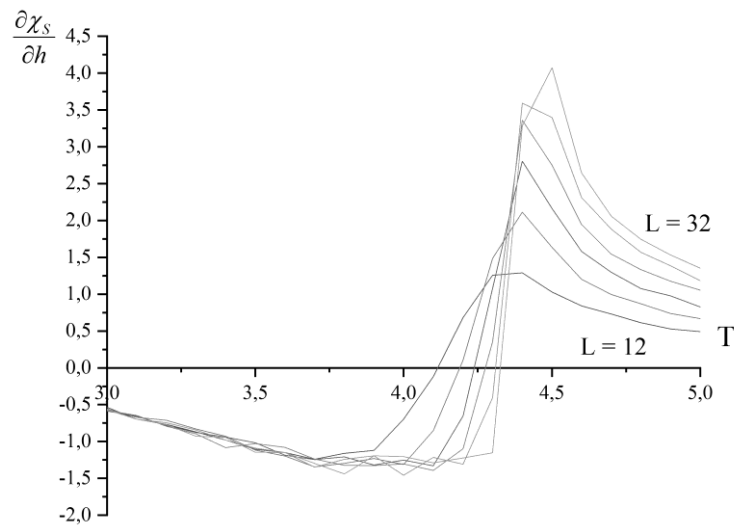


Рисунок 2.37. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 0.9$.

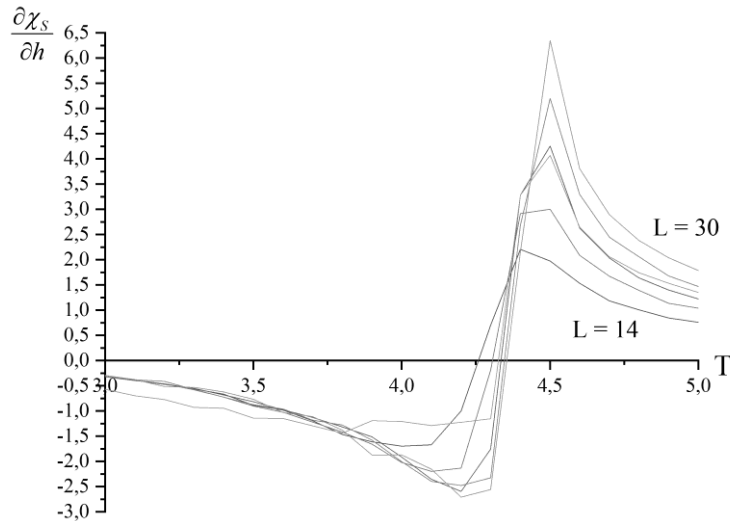


Рисунок 2.38. Зависимость $\frac{\partial \chi_s}{\partial h}$ от температуры для систем различного размера при $R = 1.0$.

Как хорошо видно из графиков производная поверхностной восприимчивости испытывает скачок при $T = 4.40$, которую можно считать температурой поверхностного фазового перехода. Также при температуре поверхностного фазового перехода наблюдаются характерные пики, высота которых зависит от размера системы. Следует отметить, что температура, при которой производная поверхностной восприимчивости испытывает скачок, одинакова для всех систем с $R < 1.0$.

Таким образом для поверхностного фазового перехода в антиферромагнитной модели Изинга с $R < 1.0$ наблюдается гладкое поведение поверхностного параметра порядка и его первой производной, тогда как вторая производная испытывает скачок. Отсюда можно сделать вывод, что рассматриваемый фазовый переход близок по своим параметрам к фазовому переходу третьего рода.

При этом точка $R = R_1$ на линии фазового перехода является для системы особой, так как в ней происходит смена рода фазового перехода. Об изменении рода фазового перехода также свидетельствует характер зависимости параметра порядка от температуры. При $R < R_1$ зависимость m_s от T носит линейный характер, а при $R \geq R_1$ наблюдается степенная зависимость.

Из компьютерного эксперимента вытекает, что при $R < R_1$ для поверхностного параметра порядка наблюдается линейная зависимость от температуры вблизи точки фазового перехода. Для поверхностного параметра порядка можем записать

$$m_S = D(T - T_S), \quad (2.16)$$

где D – некоторая константа, а T_S – температура поверхностного фазового перехода. Согласно теории среднего поля Ландау энтропия системы (S) вблизи точки фазового перехода

$$S = S_0 - am_S^2, \quad (2.17)$$

где a – константа. Откуда получаем

$$S = S_0 - aD(T - T_S)^2. \quad (2.18)$$

Для теплоемкости можем записать выражение

$$C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) = C_0 - 2aD(T - T_S). \quad (2.19)$$

Отсюда следует, что при $T = T_S$ второе слагаемое зануляется и теплоемкость не испытывает скачка, характерного для фазового перехода второго рода.

Найдем производную теплоемкости

$$\left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{T=T_S} = \frac{\partial C_0}{\partial T} - 2aD. \quad (2.20)$$

Из этого выражения видно, что при $T = T_S$ скачок будет испытывать производная от теплоемкости, что характерно для фазового перехода третьего рода.

2.5 Критическое поведение приповерхностной области

Кроме поверхностного слоя спинов рассматривались также ближайšie к нему семь слоев, для каждого из которых вычислялась шахматная намагниченность m_i ($i = 1, \dots, 7$), а также вычислялись кумулянты Биндера:

$$U_i = 1 - \frac{\langle m_i^4 \rangle}{3\langle m_i^2 \rangle^2}, \quad (i = 1, \dots, 7) \quad (2.21)$$

Для каждого из этих слоев определялась температура фазового перехода T_i ($i = 1, \dots, 7$).

Рассмотрим поведение системы на интервале $R_1 < R < R_0$. Будем следить за поверхностным слоем и следующими за ним семью слоями. Для каждого слоя будем определять температуру фазового перехода на основе кумулянтов Биндера U_s, U_i ($i = 1, \dots, 7$). На рисунке 2.39 приведена зависимость температуры фазового перехода от номера слоя спинов для нескольких значений R . Нумерация спиновых слоев осуществлялась начиная от свободной поверхности.

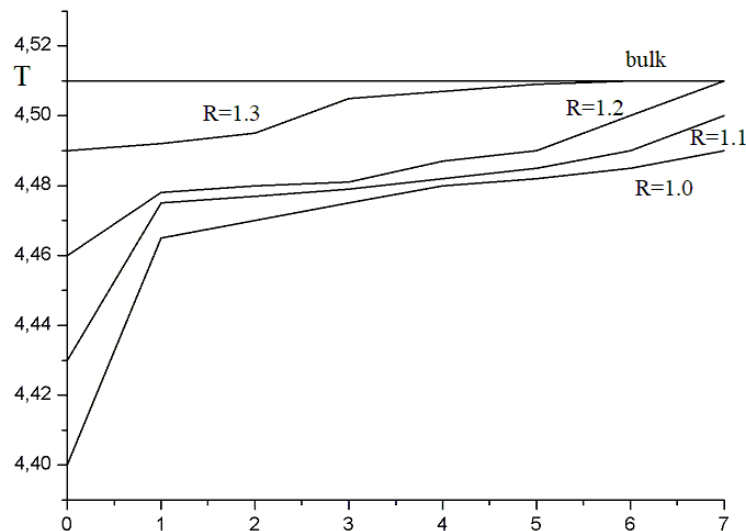


Рисунок 2.39. Зависимость температуры фазового перехода от номера слоя спинов для нескольких значений R . Нулевой номер слоя соответствует свободной поверхности. Горизонтальной линией показана температура объемного фазового перехода (bulk).

Полученные зависимости температуры перехода от расстояния до поверхности находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными для Fe_3BO_6 [9] и $FeBO_3$ [7].

2.6 Обсуждение результатов

Из результатов, изложенных выше, можно сделать вывод о том, что поведение полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга существенно отличается как от поведения ферромагнитного аналога, так и от предсказаний теории среднего поля. Прежде всего необходимо отметить тетракритический, а не трикритический характер мультикритической точки. Во-вторых, при определенных значениях отношения обменных интегралов может существовать фаза, в которой наблюдается объемное упорядочение спинов при отсутствии поверхностного порядка. Существование данной фазы подтверждается в ряде экспериментальных работ [7, 9]. Исследования методом Монте-Карло подтверждают выводы экспериментальных работ об относительной малости разности температур объемного и поверхностного переходов по сравнению с температурой Нееля [7, 8, 9, 10, 11].

Отдельно необходимо рассматривать системы, для которых обменное взаимодействие между спинами на поверхности меньше, чем в основном объеме образца. В этом случае температура поверхностного фазового перехода ниже температуры Нееля. Однако поверхностный фазовый переход находится под сильным влиянием спиновых слоев, расположенных вблизи поверхности. Домены, формирующиеся в основном объеме образца, выходят на поверхность. В результате для поверхностного спинового слоя не наблюдается неустойчивое состояние, характерное для окрестности фазового перехода второго рода. Как следствие, отсутствует скачок в поведении термодинамических функций, являющихся вторыми производными свободной энергии. Однако такой скачок присутствует в зависимости третьих производных свободной энергии от

температуры. В результате в системе реализуется фазовый переход близкий по характеристикам к фазовому переходу третьего рода.

Таким образом, в полуограниченных антиферромагнитных системах, для которых обменный интеграл на поверхности составляет менее 1.38 от обменного интеграла в объеме системы, температура фазового перехода поверхностного слоя и ближайших к нему слоев ниже температуры Нееля. Компьютерное моделирование показало разность температур по порядку величины совпадающую с наблюдаемой в реальном эксперименте [7, 9].

Следует отметить, что для антиферромагнетиков эффект отличия температуры поверхностного фазового перехода от температуры объемного фазового перехода носит более ярко выраженный характер по сравнению с ферромагнетиками [3, 162]. Это отличие вызвано тем, что в ферромагнитных системах домены характеризуются не нулевым магнитным моментом и создают собственное магнитное поле, влияющее на формирование упорядоченной фазы на свободной поверхности.

2.7 Выводы

На основе результатов компьютерного моделирования полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга можно сделать следующие выводы:

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.

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.

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.

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.

Глава 3. Поверхностный антиферромагнетизм тонких пленок

3.1 Введение

Поверхностный фазовый переход, наблюдаемый в полубесконечных системах, может отсутствовать в тонких пленках. В монослойной пленке или пленке из двух моноатомных слоев поверхностный фазовый переход тождественен обычному фазовому переходу, так как нет других спиновых слоев кроме поверхностных. Увеличение количества атомных слоев пленки должно приводить к разделению поверхностного фазового перехода и объемного фазового перехода при больших значениях поверхностной энергии. Появление поверхностного фазового перехода обусловлено тем, что в пределе увеличения толщины пленка переходит в полубесконечную систему, в которой наблюдается существование фазы с упорядоченными на поверхности спинами и неупорядоченными спинами в основном объеме. Должна существовать критическая толщина тонкой пленки, начиная с которой в системе происходит поверхностный фазовый переход. Определение этой толщины является актуальной задачей.

В полубесконечных системах линии поверхностного и объемного фазового переходов пересекаются в трикритической точке, получившей название объемного фазового перехода. Для полубесконечных систем специальный фазовый переход происходит если константа обменного взаимодействия на поверхности превышает константу обменного взаимодействия в объеме системы в 1.55 раз. Для тонких пленок можно ожидать увеличения этого значения, связанного с тем, что поверхностный слой оказывает влияние на ближайшие к нему слои спинов. Влияние поверхностного слоя спинов на основной объем убывает по экспоненциальному закону от расстояния до поверхности. Для полубесконечных систем такое влияние не существенно, так как количество спинов, упорядоченных под влиянием поверхности мало по сравнению с

основным объемом системы. Для тонких пленок этим эффектом пренебрегать нельзя, так как расстояние, на котором влияние поверхностного упорядочивания становится незначительным, соизмеримо с толщиной пленки. Поэтому актуальной является задача определения положения точки специального фазового перехода на фазовой диаграмме системы в зависимости от толщины пленки.

Целью данной главы является исследование фазовых переходов в тонких пленках, описываемых антиферромагнитной моделью Изинга методом компьютерного моделирования при различных значениях поверхностной энергии.

3.2 Описание системы

В рассматриваемой модели тонкая пленка представляет собой набор атомных слоев с кубической кристаллической решеткой. Каждому атому с номером i сопоставляется значение спина S_i . В дальнейшем описание ограничено моделью Изинга, поэтому значение спина S_i может принимать одно из двух значений ($+1/2$ или $-1/2$). Взаимодействие между ближайшими соседями носит антиферромагнитный характер. Поверхностный антиферромагнетизм проявляется, если энергия взаимодействия спинов на поверхности пленки отличается от аналогичного значения в объеме системы. Константу обменного взаимодействия в объеме системы обозначим J_0 . На поверхности системы константа обменного взаимодействия равна J_s . Поверхностный фазовый переход возможен в случае $J_s > J_0$. При компьютерном моделировании удобнее пользоваться относительными величинами. Поэтому все энергетические параметры системы будем вычислять в единицах J_0 . Введем отношение констант обменного взаимодействия.

$$R = \frac{J_s}{J_0} \quad (3.1)$$

Для данной величины выполняется неравенство $R \geq 1$. Исследования проводились для различных значений R . Минимальное значение R , при котором

возникает поверхностный антиферромагнетизм является одной из целей моделирования.

Схематически распределение обменных констант представлено на рисунке 3.1.

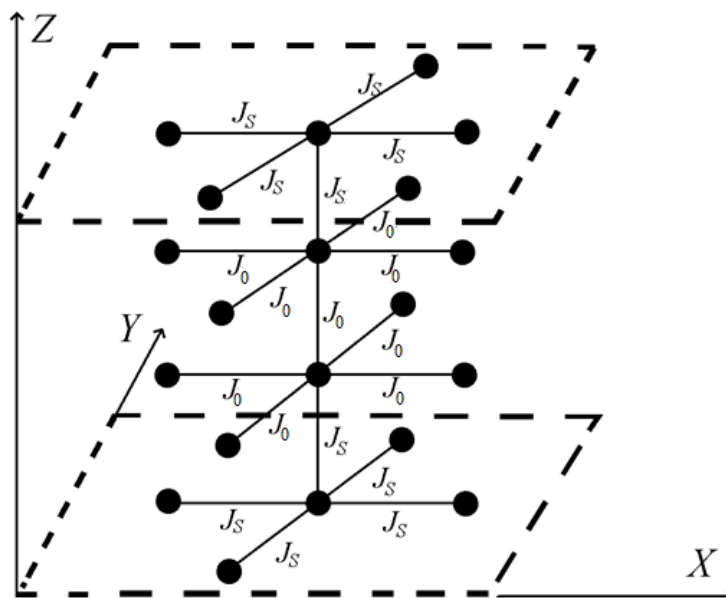


Рисунок 3.1. Распределение констант обменного взаимодействия между слоями тонкой пленки при $D = 4$.

Гамильтониан модели Изинга вычисляется как сумма энергий парных взаимодействий спинов.

$$H = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_s \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \mu_B h_0 \sum S_i \quad (3.2)$$

В гамильтониане суммирование берется только по парам $\langle i, j \rangle$ ближайших соседей. Во втором слагаемом берутся только пары спинов, лежащие на поверхности. В первом слагаемом хотя бы один спин должен быть расположен не на поверхности. В относительных единицах гамильтониан примет вид:

$$\frac{H}{J_0} = \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + R \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum S_i \quad (3.3)$$

Для температуры системы t также будем использовать относительную величину.

$$T = \frac{k_B t}{J_0} \quad (3.4)$$

k_B – постоянная Больцмана.

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. Исследуемая 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 вдоль осей OX и OY . Принцип применения периодических граничных условий показан на рисунке 3.2.

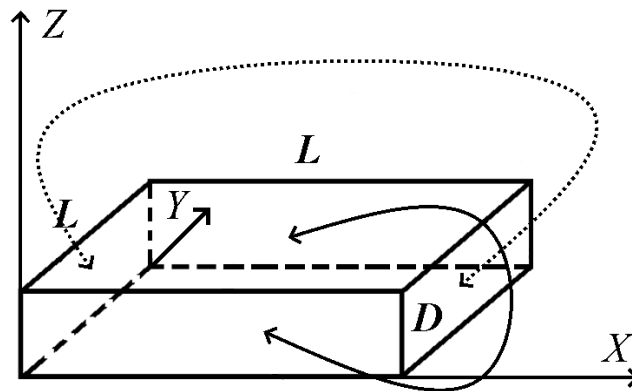


Рисунок 3.2. Периодические граничные условия для тонких пленок.

Для исследования возможности появления поверхностного антиферромагнетизма необходимо изучить процессы упорядочивания спинов на поверхности и в объеме системы. Поэтому тонкие пленки рассматривались как три взаимодействующие подсистемы. Две подсистемы представляли собой свободные поверхности, то есть моноатомные слои, ограничивающие пленку. Третьей системой было множество спинов в объеме пленки без двух крайних слоев. Первая и вторая системы расположены симметрично и демонстрируют одинаковое поведение при изменении температуры системы. Поэтому в компьютерном эксперименте отслеживалось только упорядочивание спинов на поверхности $z = 0$. Контрольные эксперименты показали, что

термодинамические функции имеют одинаковое значение для обеих плоскостей, ограничивающих пленку.

Для описания процессов упорядочивания спинов в объеме системы вводился антиферромагнитный параметр порядка m_a , который вычислялся как разность намагниченностей двух подрешеток, сдвинутых относительно друг друга на постоянную решетки вдоль осей OX , OY и OZ . Первую подрешетку будем называть четной (*even*), а вторую нечетной (*odd*). Тогда антиферромагнитный параметр порядка вычисляется как разность двух сумм, отнесенная к общему числу спинов в системе.

$$m_a = \frac{\left(\sum_{even} S_i - \sum_{odd} S_i \right)}{L^2(D-2)} \quad (3.5)$$

Для характеристики поверхностного упорядочивания спинов введем аналогичный антиферромагнитный поверхностный параметр порядка m_s , который также будет равен разности намагниченностей двух двумерных подрешеток.

$$m_s = \frac{\left(\sum_{even_S} S_i - \sum_{odd_S} S_i \right)}{L^2} \quad (3.6)$$

even_S – это четная подрешетка на поверхности пленки, *odd_S* – нечетная подрешетка на поверхности пленки.

При случайных направлениях спинов оба параметра порядка будут иметь нулевое значение, а при антиферромагнитном упорядочивании единичное. В двух исследуемых системах при понижении температуры происходит фазовый переход из парамагнитной фазы в антиферромагнитную. Для построения фазовой диаграммы для тонкой пленки исследовались температуры фазовых переходов отдельно для поверхности пленки и для основного объема для различных значений отношения констант обменного взаимодействия R .

Для исследования системы применялись алгоритм Метрополиса [102] и теория конечномерного скейлинга [142]. В рамках этих подходов

рассматривались системы с различным линейным размером L . Алгоритм Метрополиса формирует различные термодинамические состояния спиновой системы, соответствующие заданной температуре. На основе усреднения параметров системы по различным термодинамическим конфигурациям вычисляются термодинамические функции системы. В дальнейшем для среднего значения некоторой величины по термодинамическим состояниям используются угловые скобки ($\langle \dots \rangle$).

Для подробного описания фазовых переходов в тонких пленках было использовано несколько параметров.

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

$$\chi_a = \frac{\partial m_a}{\partial h} = \frac{L^2(D-2)(\langle m_a^2 \rangle - \langle m_a \rangle^2)}{T} \quad (3.7)$$

$$\chi_s = \frac{\partial m_s}{\partial h} = \frac{L^2(\langle m_s^2 \rangle - \langle m_s \rangle^2)}{T} \quad (3.8)$$

h – напряженность магнитного поля.

Теплоемкость основного объема C и свободной поверхности C_s :

$$C = \frac{\partial E_a}{\partial T} = \frac{L^2(D-2)(\langle E_a^2 \rangle - \langle E_a \rangle^2)}{T} \quad (3.9)$$

$$C_s = \frac{\partial E_s}{\partial T} = \frac{L^2(\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2)}{T} \quad (3.10)$$

E_a – это энергия антиферромагнитного взаимодействия спинов в основном объеме системы. E_s – это энергия антиферромагнитного взаимодействия спинов свободной поверхности. Обе энергии вычисляются на основе гамильтониана (3.3).

Кумулянты Биндера четвертого порядка для обоих параметров порядка:

$$U_a = 1 - \frac{\langle m_a^4 \rangle}{3\langle m_a^2 \rangle^2} \quad (3.11)$$

$$U_S = 1 - \frac{\langle m_S^4 \rangle}{3\langle m_S^2 \rangle^2} \quad (3.12)$$

Кумулянты Биндера четвертого порядка для энергии системы:

$$V_a = 1 - \frac{\langle E_a^4 \rangle}{3\langle E_a^2 \rangle^2} \quad (3.13)$$

$$V_S = 1 - \frac{\langle E_S^4 \rangle}{3\langle E_S^2 \rangle^2} \quad (3.14)$$

Все эти четыре вида термодинамических параметров могут быть использованы для определения температуры фазового перехода. Наиболее точное значение может быть получено с помощью кумулянтов Биндера U_a и U_S для параметров порядка. Для этого необходимо провести моделирование для систем с различным линейным размером. Основным свойством этих кумулянтов является то, что их значение не зависит от размера системы при температуре фазового перехода. Таким образом, графики зависимости кумулянтов Биндера от температуры для систем различного размера пересекаются в одной точке. Положение этой точки соответствует критической температуре. Это свойство позволяет определять температуру фазового перехода с точностью выше, чем шаг алгоритма по температуре. Кроме этого, кумулянты Биндера для параметров порядка чувствительны к изменению рода фазового перехода. Точка пересечения графиков хорошо локализуется только для фазовых переходов второго рода [15]. Для фазовых переходов первого рода одна точка пересечения отсутствует.

Температура фазового перехода также может определяться по графику зависимости теплоемкости от температуры. При температуре фазового перехода на графике должен присутствовать отчетливый пик. При этом надо рассматривать несколько систем различного размера для более точной локализации положения пика. Точность такого метода определения критической температуры определяется шагом алгоритма моделирования по температуре. Также следует учитывать, что данный метод не позволяет получить отчетливый пик для

двумерных систем, так как при данной размерности магнетика отсутствует сингулярное поведение теплоемкости вблизи точки фазового перехода.

Метод определения критической температуры по магнитной восприимчивости аналогичен подходу на основе теплоемкости. Восприимчивость системы испытывает скачок в точке фазового перехода. Этот скачок проявляется в виде пика на графике зависимости восприимчивости от температуры.

На графиках зависимости кумулянтов Биндера V_a и V_s для энергии от температуры также присутствует пик в точке фазового перехода. Следует отметить, что этот пик соответствует минимуму функции, а не максимуму, как для теплоемкости и восприимчивости. Точки, соответствующие минимуму, подчиняются соотношению:

$$V_a(\min) \sim L^{-2}, V_s(\min) \sim L^{-2}. \quad (3.15)$$

Поэтому, графики зависимости $V_a(\min)$ и $V_s(\min)$ от L^{-2} являются прямыми. Точки пересечения этих прямых с осью ординат позволяют делать вывод о роде фазового перехода. Для фазовых переходов второго рода график пересекает ось в точке $2/3$. Для фазовых переходов первого рода точка пересечения находится ниже значения $2/3$ [15].

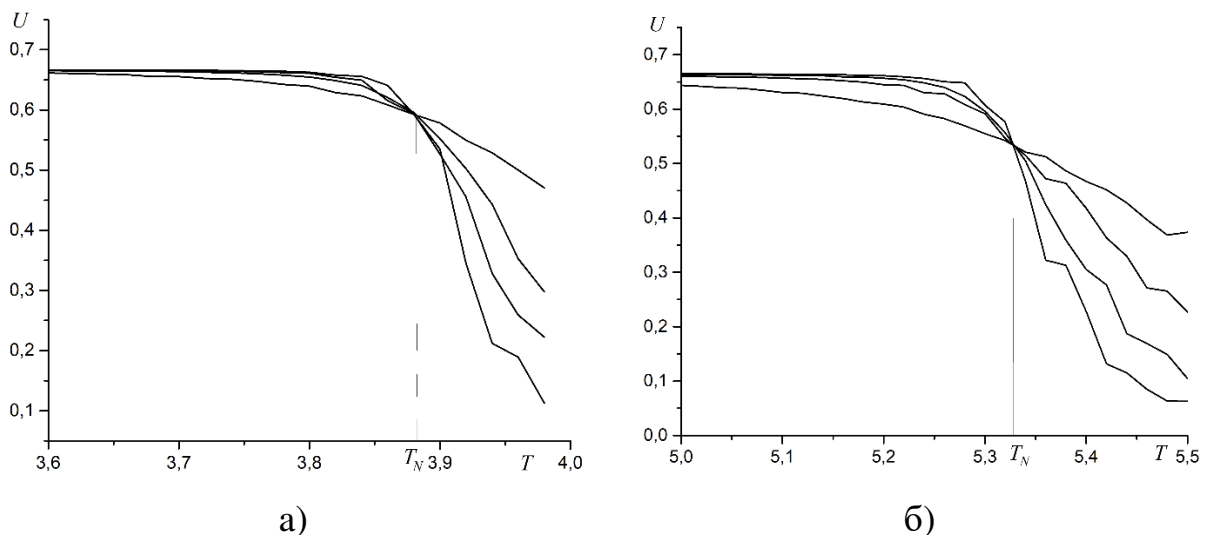
3.3 Результаты компьютерного эксперимента

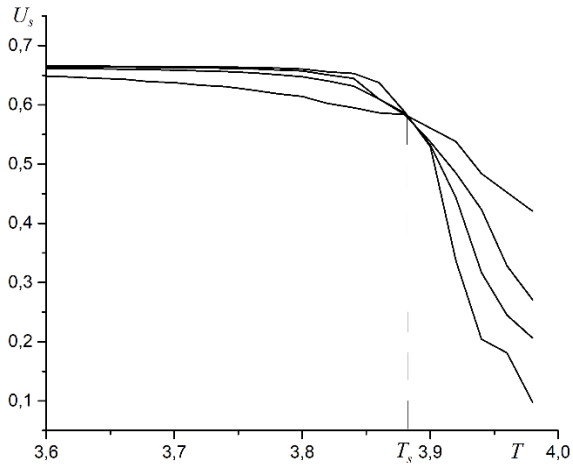
Компьютерный эксперимент проводился для антиферромагнитных пленок толщиной от $D = 4$ слоев до $D = 16$ слоев с шагом $\Delta D = 2$. Линейные размеры системы изменялись от $L = 16$ до $L = 64$ с шагом $\Delta L = 16$. Отношение констант обменного взаимодействия изменялось от $R = 1.0$ до $R = 3.0$ с шагом $\Delta R = 0.1$. Значение отношения констант обменного взаимодействия влияет на поверхностную энергию системы, которая складывается из энергии взаимодействия поверхностных спинов между собой и взаимодействия поверхностных спинов со спинами первого подповерхностного слоя. 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. Упорядочивание спинов в поверхностном слое оказывает влияние на ориентацию спинов в основном объеме. Если основной объем пленки по своим размерам существенно превышает количество спинов в поверхностном слое, то этим воздействием можно пренебречь. Если количество спинов в основном объеме пленки сопоставимо с количеством спинов в поверхностном слое, то это влияние становится существенным и может определять поведение системы.

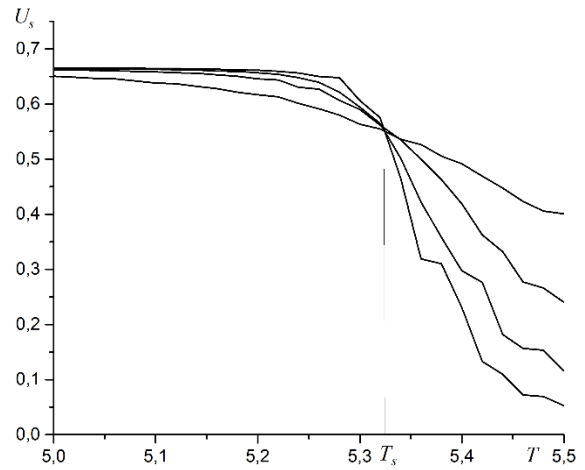
3.3.1. Пленки толщиной $D = 4$ и $D = 6$

Для пленок толщиной $D = 4$ и $D = 6$ размеры основного объема совпадают ($D = 4$) или превышают в два раза ($D = 6$) размеры поверхностного слоя. В связи с этим температура для поверхностного фазового перехода T_S совпадает с температурой Нееля в основном объеме T_N ($T_S = T_N$). Эти две температуры достаточно четко локализуются по кумулянтам Биндера для параметров порядка. На рисунке 3.3 представлены зависимости поверхностных и объемных кумулянтов Биндера от температуры для пленки толщиной $D = 4$ и четырех различных значений отношения констант обменного взаимодействия.





в)

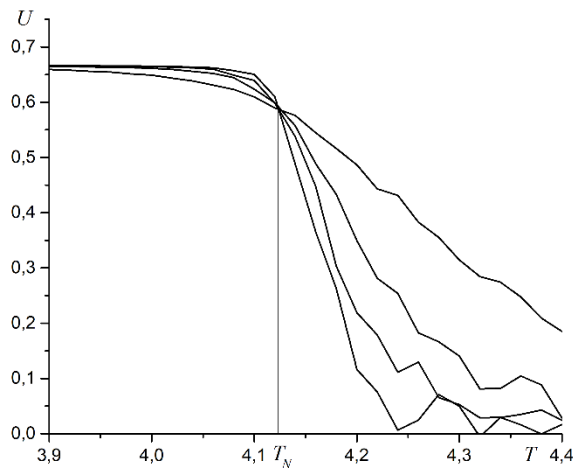


г)

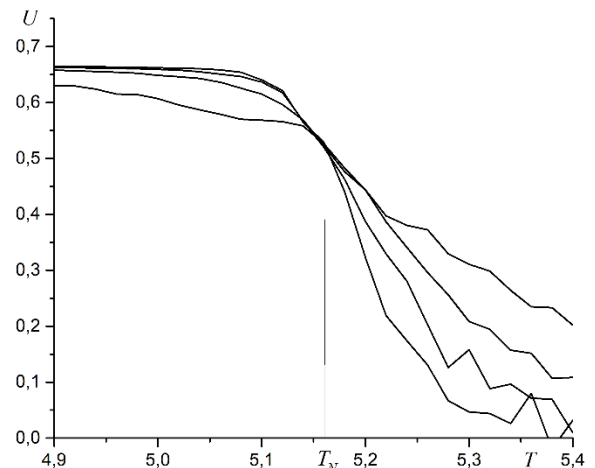
Рисунок 3.3. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для пленки толщиной $D = 4$.

а) U при $R = 1.0$, б) U при $R = 2.0$, в) U_s при $R = 1.0$, г) U_s при $R = 2.0$.

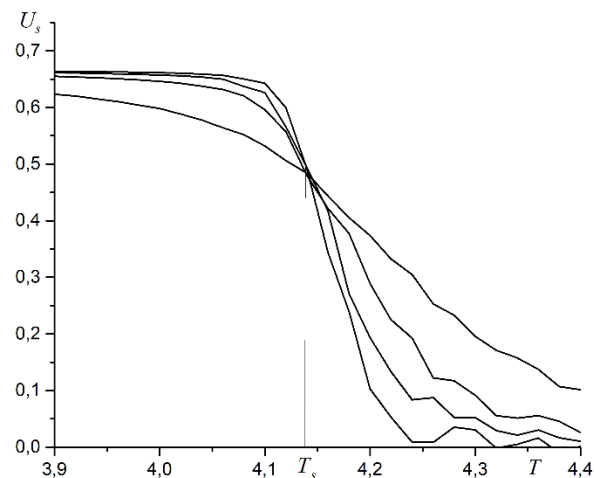
Графики зависимости кумулянтов Биндера для параметров порядка при толщине пленки $D = 6$ приведены на рисунке 3.4.



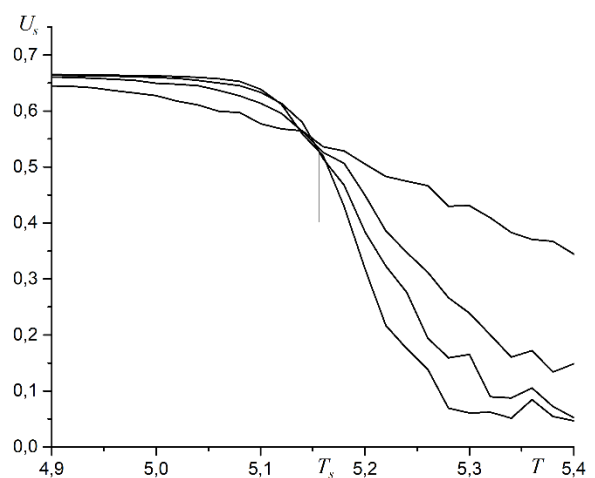
а)



б)



в)



г)

Рисунок 3.4. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры для пленки толщиной $D = 6$.

а) U при $R = 1.0$, б) U при $R = 2.0$, в) U_s при $R = 1.0$, г) U_s при $R = 2.0$.

Из этих графиков видно, что температуры поверхностного и объемного фазовых переходов совпадают, поэтому можно говорить об единой температуре фазового перехода T_N в таких пленках. Аналогичные результаты можно получить и из исследования графиков других термодинамических функций. На рисунках 3.5 – 3.8 приведены графики зависимости объемных и поверхностных теплоемкости и магнитной восприимчивости.

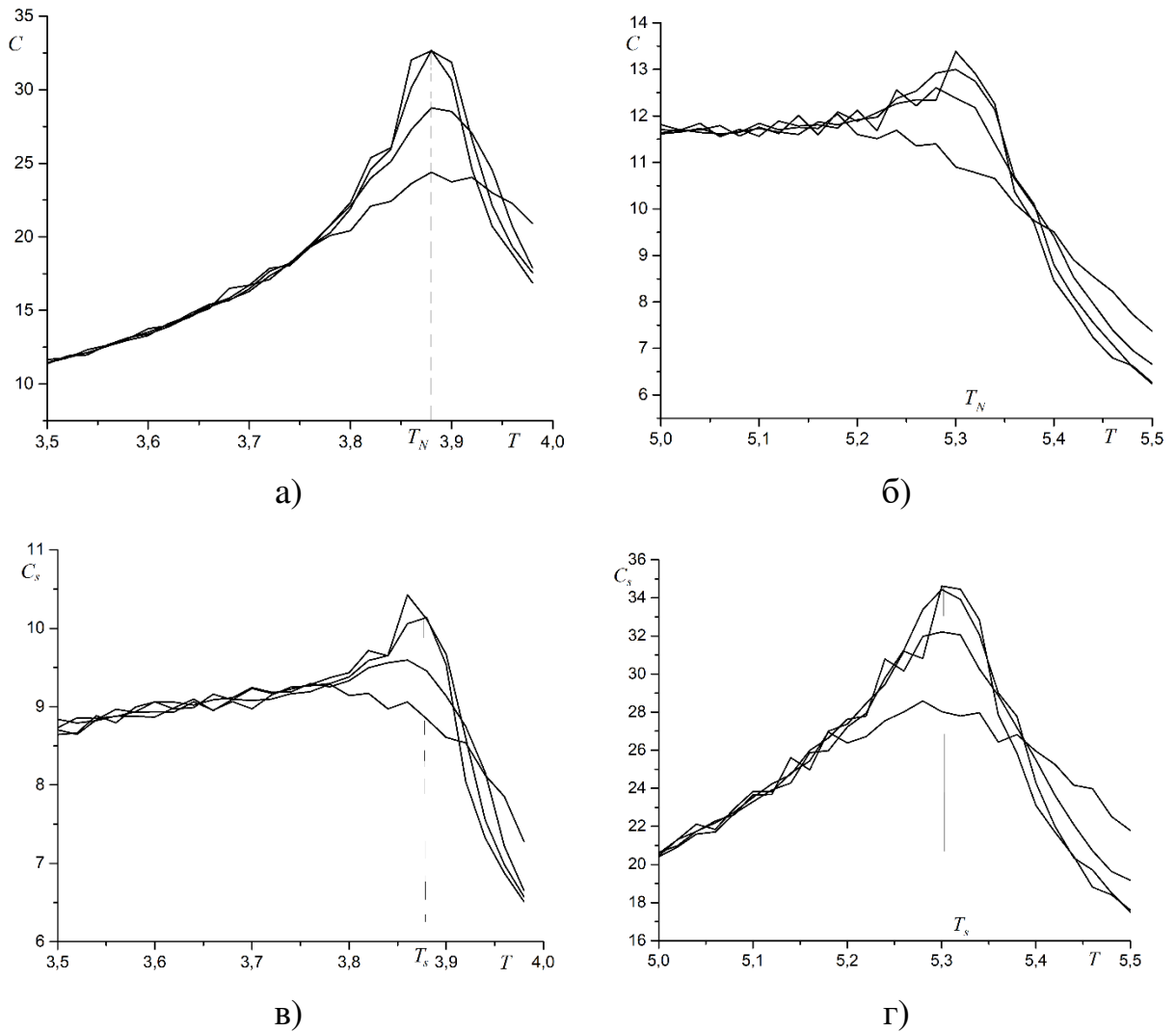
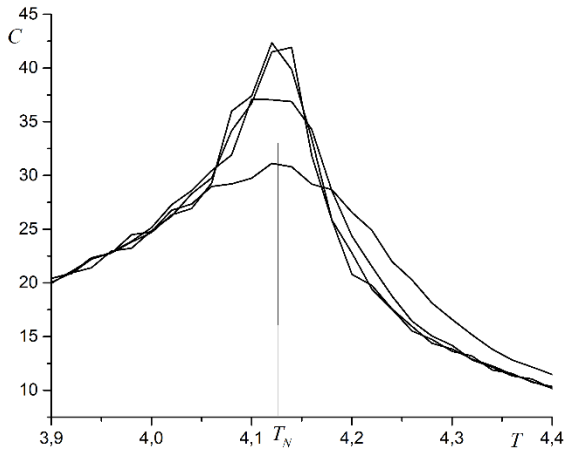
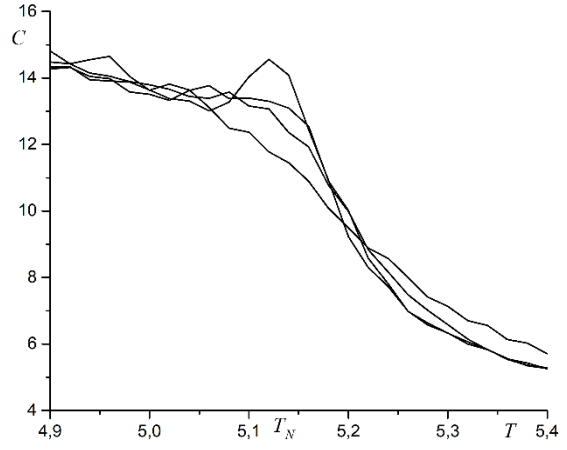


Рисунок 3.5. Зависимость теплоемкости от температуры для пленки толщиной $D = 4$.

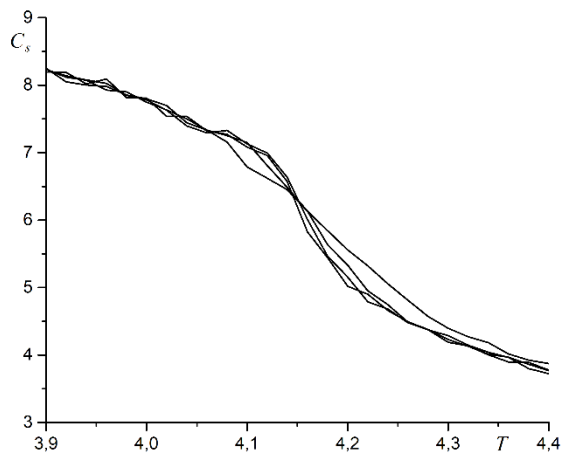
а) C при $R = 1.0$, б) C при $R = 2.0$, в) C_s при $R = 1.0$, г) C_s при $R = 2.0$.



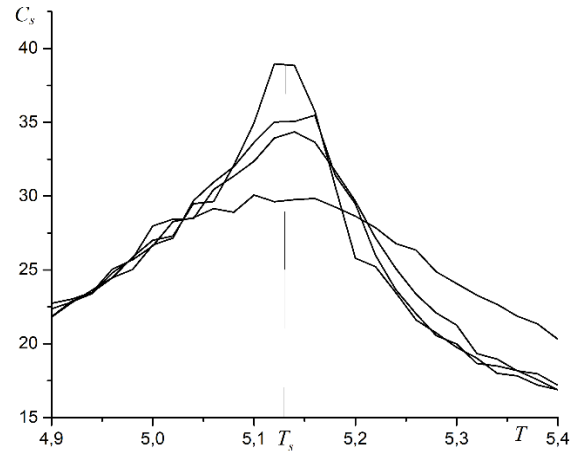
а)



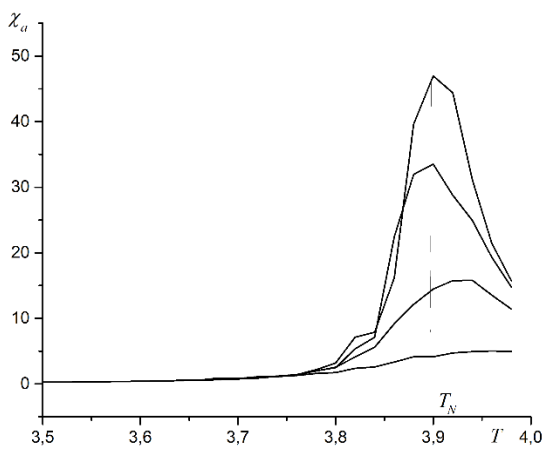
б)



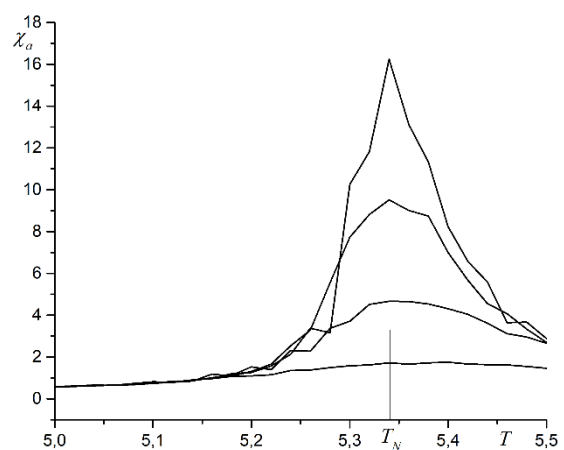
в)



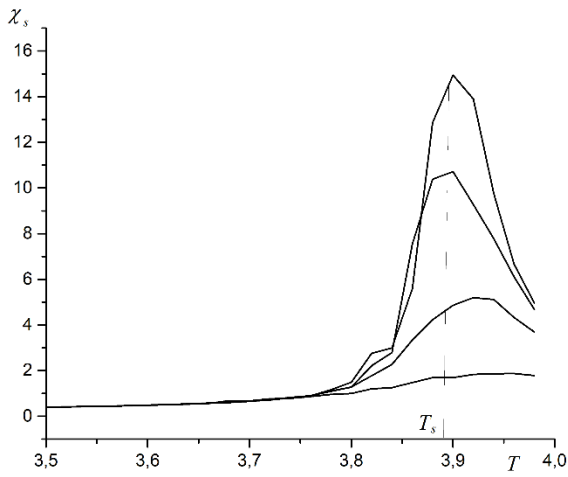
г)

Рисунок 3.6. Зависимость теплоемкости от температуры для пленки толщиной $D = 6$.а) C при $R = 1.0$, б) C при $R = 2.0$, в) C_s при $R = 1.0$, г) C_s при $R = 2.0$.

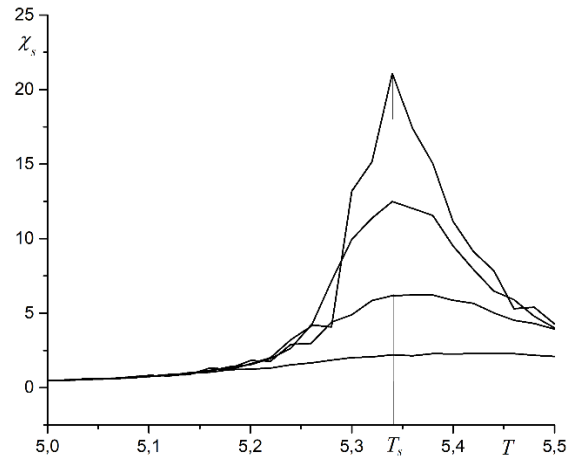
а)



б)

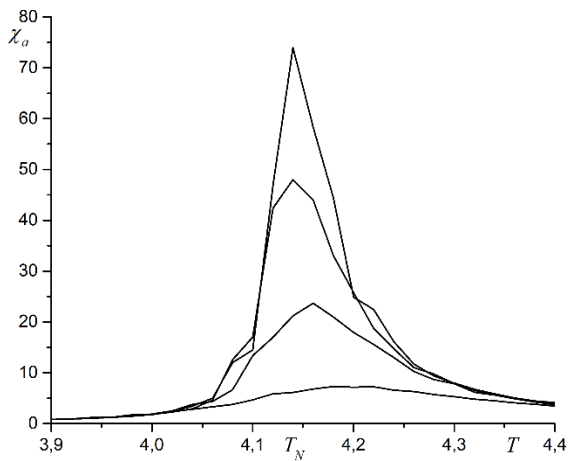


в)

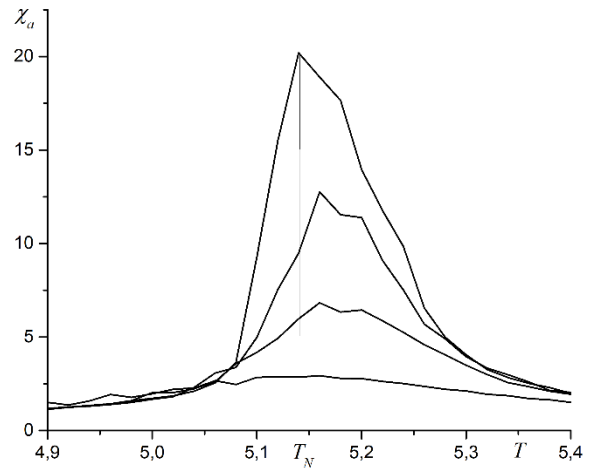


г)

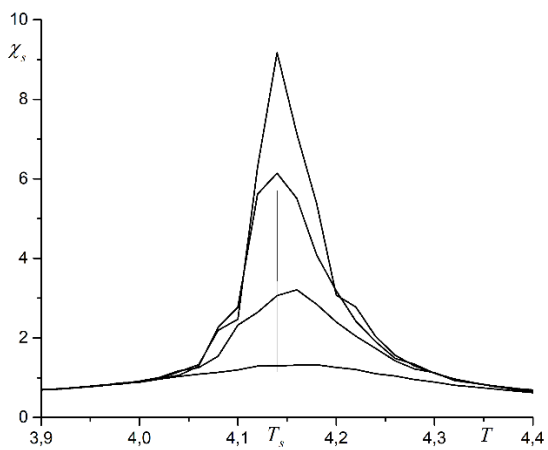
Рисунок 3.7. Зависимость магнитной восприимчивости от температуры для пленки толщиной $D = 4$. а) χ_a при $R = 1.0$, б) χ_a при $R = 2.0$, в) χ_s при $R = 1.0$, г) χ_s при $R = 2.0$.



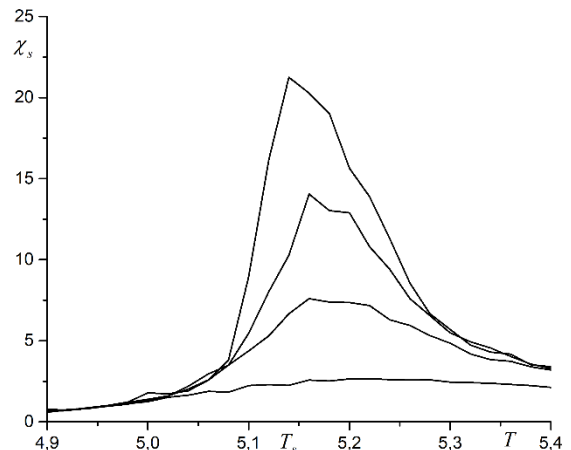
а)



б)



в)



г)

Рисунок 3.8. Зависимость магнитной восприимчивости от температуры для пленки толщиной $D = 6$. а) χ_a при $R = 1.0$, б) χ_a при $R = 2.0$, в) χ_s при $R = 1.0$, г) χ_s при $R = 2.0$.

Графики зависимости температуры фазового перехода T_N от отношения констант обменного взаимодействия представлены на рисунке 3.9.

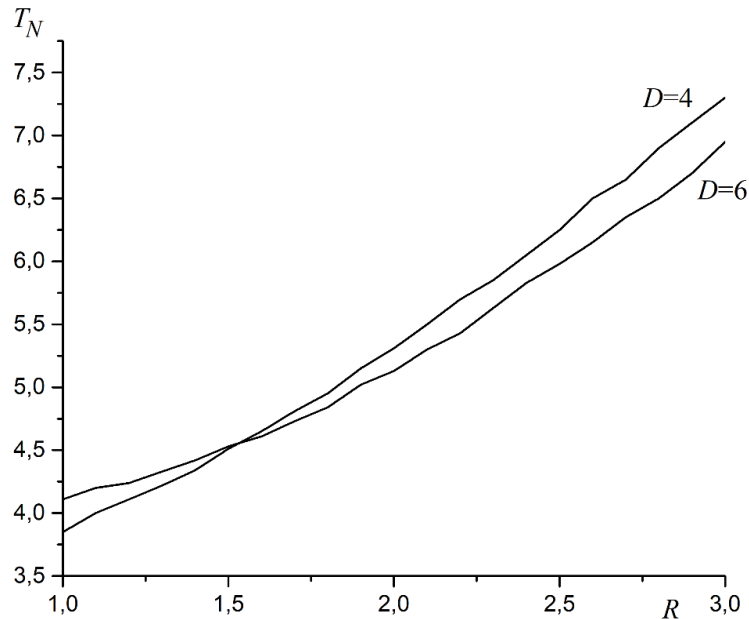


Рисунок 3.9. Зависимость температуры антиферромагнитного фазового перехода T_N от отношения констант обменного взаимодействия R для пленок толщиной $D = 4$ и $D = 6$.

Как видно из графика при значениях $R < 1.5$ температура фазового перехода в пленке толщиной $D = 6$ выше, чем в пленке толщиной $D = 4$ ($T_N(D = 6) > T_N(D = 4)$). 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 $D = 4$. Рост температуры при изменении R связан с увеличением средней энергии взаимодействия, приходящейся на один спин E_1 .

Эта величина для пленки толщиной D равна:

$$E_1(D, R) = \frac{J_0}{D} (3(D - 2) + 4R) \quad (3.16)$$

Равенство температур фазового перехода для пленок толщиной $D = 4$ и $D = 6$ происходит при таком R_0 , когда выполняется равенство:

$$E_1(4, R_0) = E_1(6, R_0) \quad (3.17)$$

Из этого уравнения получается значение $R_0 = 1.5$, что совпадает с результатами компьютерного эксперимента. В дальнейшем температура Нееля для пленок толщиной $D = 6$ становится меньше, чем для $D = 4$. Это обусловлено тем, что скорость роста обратно пропорциональна толщине пленки. Следует учесть, что оценка величины температуры по среднему значению энергии на спин не является точной, а зависимость температуры от отношения констант обменного взаимодействия отличается от линейной.

3.3.2. Пленки толщиной $D > 6$

Как было показано в предыдущем разделе для пленок толщиной $D \leq 6$ поверхностный антиферромагнитный фазовый переход отсутствует. Совершенно другая картина наблюдается для пленок с толщиной $D \geq 8$. В этих пленках существует критическое значение отношения констант обменного взаимодействия R_c , выше и ниже которого поведение системы является различным. При $R \leq R_c$ температуры поверхностного T_s и объемного T_N 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 ($T_s > T_N$). Фазовые диаграммы для пленок толщиной $D = 8$, $D = 10$, $D = 12$, $D = 14$ и $D = 16$ представлены на рисунках 3.10-3.14 соответственно.

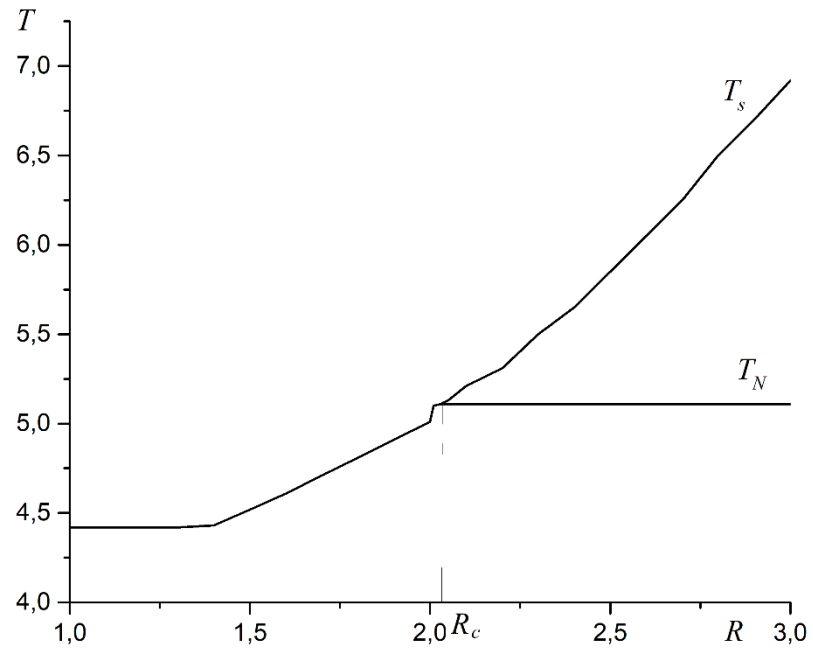


Рисунок 3.10. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 8$.

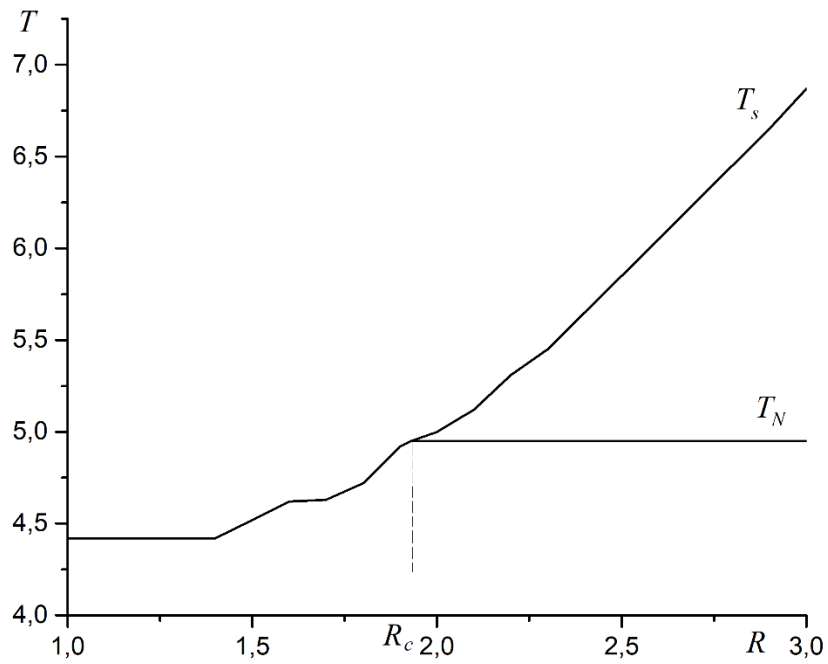


Рисунок 3.11. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 10$.

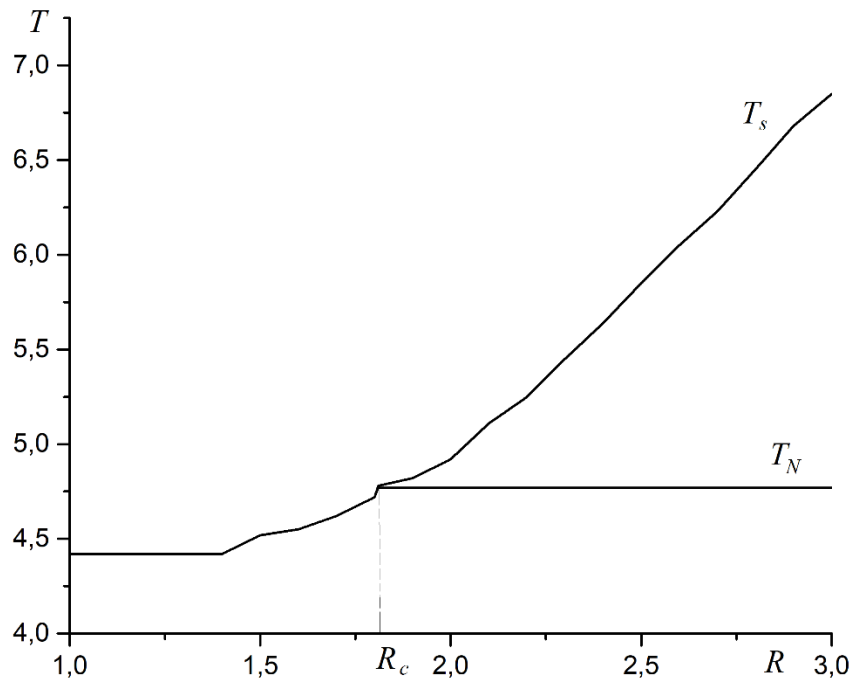


Рисунок 3.12. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 12$.

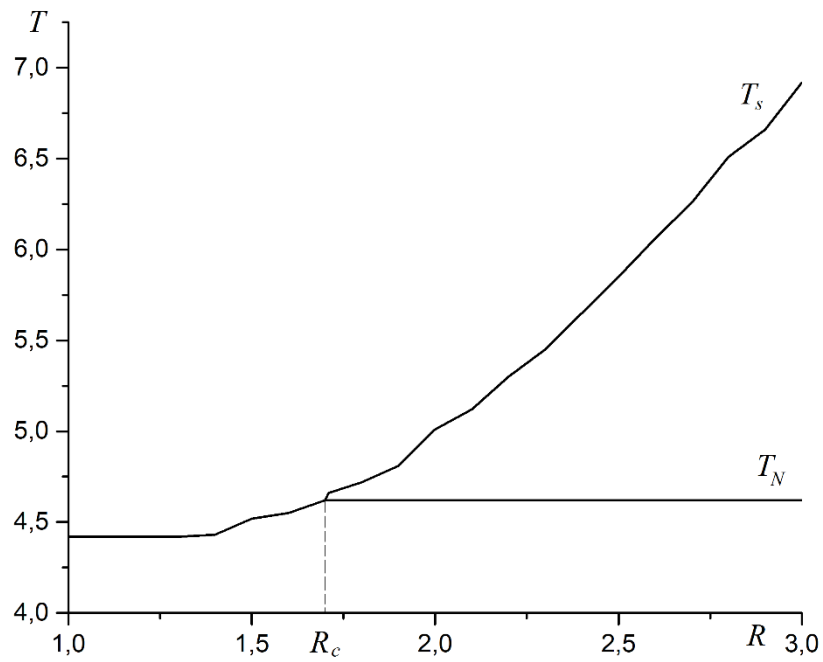


Рисунок 3.13. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 14$.

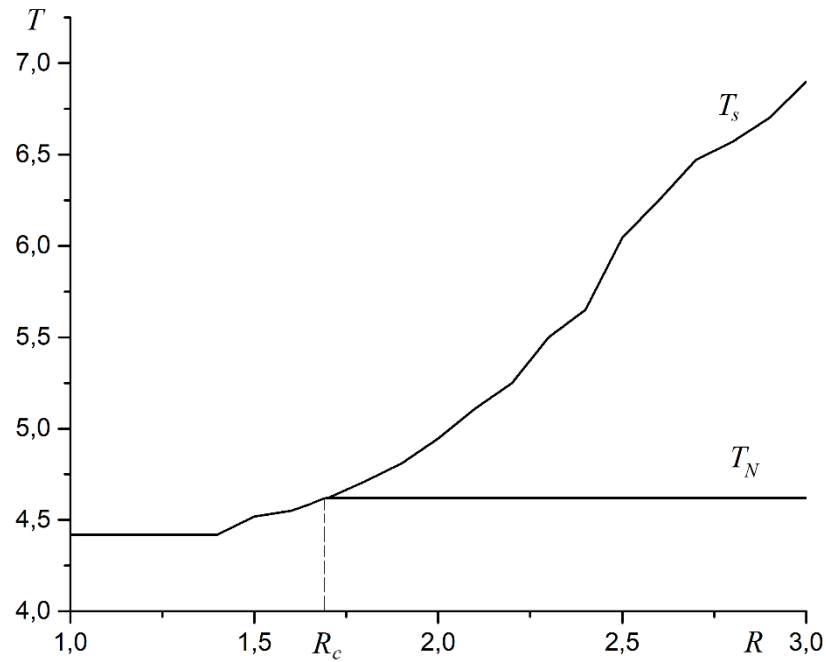


Рисунок 3.14. Фазовая диаграмма для антиферромагнитной пленки толщиной $D = 16$.

Как видно из графиков на рисунках 3.10-3.14 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 (surface) фазовый переход, при температуре T_N экстраординарный (extraordinary) фазовый переход. При $R \leq R_c$ в системе наблюдается только один обычный (ordinary) фазовый переход при температуре T_N . Температура поверхностного фазового перехода растет с увеличением параметра R , то есть поверхностной константы обменного взаимодействия. Кумулянты Биндера для поверхностного параметра порядка для пленки толщиной $D = 16$ представлены на рисунке 3.15.

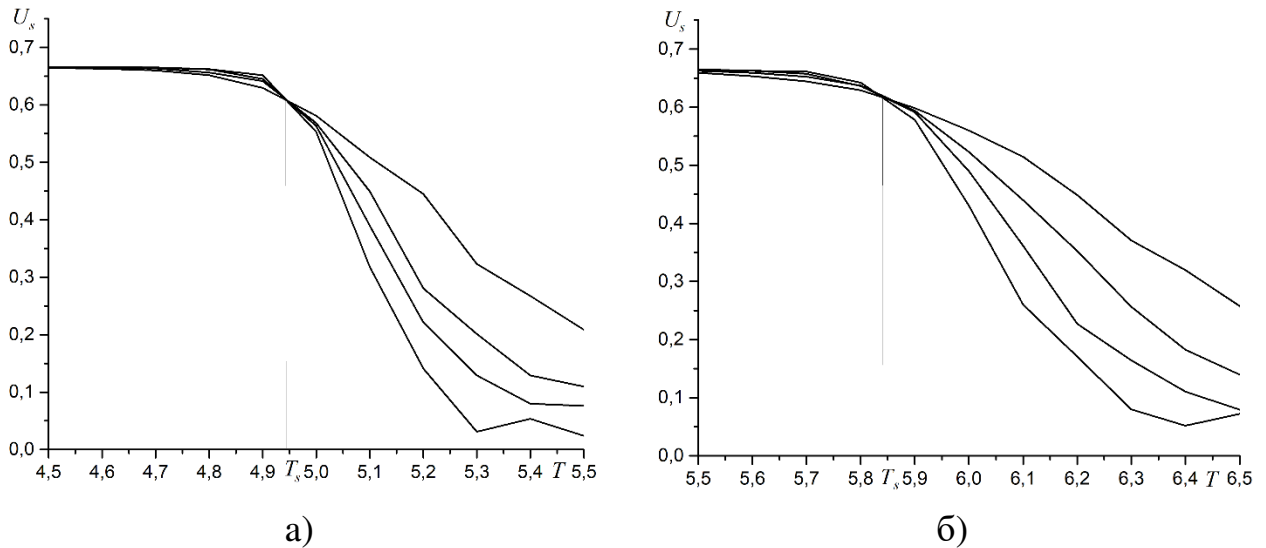


Рисунок 3.15. Зависимость поверхностных кумулянтов Биндера от температуры для пленки толщиной $D = 16$. а) $R = 2.0$, б) $R = 2.5$.

Различие в температурах упорядочивания можно видеть и на графиках других термодинамических функций. График зависимости теплоемкостей поверхностного слоя C_s и основного C объема пленки толщиной $D = 16$ с линейным размером $L = 64$ для значений $R = 1.0$ и $R = 2.5$ представлен на рисунке 3.16.

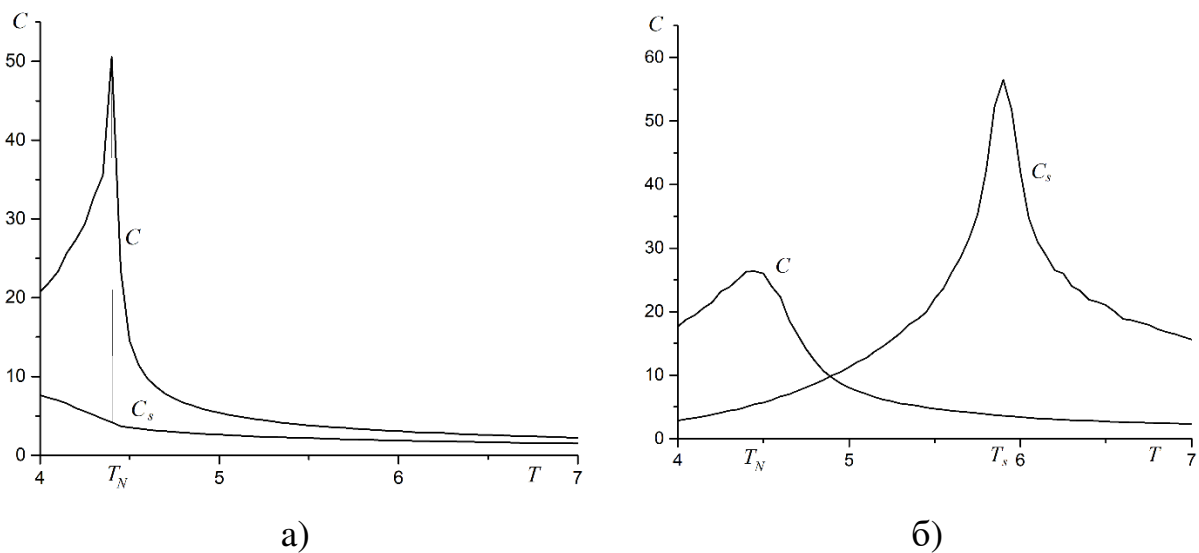


Рисунок 3.16. Зависимости теплоемкостей поверхностного слоя C_s и основного объема C от температуры T для пленки толщиной $D = 16$. а) $R = 1.0$, б) $R = 2.5$.

Как видно из графиков на рисунке 3.16 при $R = 1.0$ оба графика теплоемкостей имеют максимумы с одинаковой температурой. При $R = 2.5$

максимумы поверхностной теплоемкости C_s и объемной теплоемкости C расположены в разных точках. Отсюда можно сделать вывод о различии температур поверхностного фазового перехода T_s и экстраординарного фазового перехода T_N .

Аналогичные закономерности наблюдаются на графике магнитной восприимчивости, представленном на рисунке 3.17.

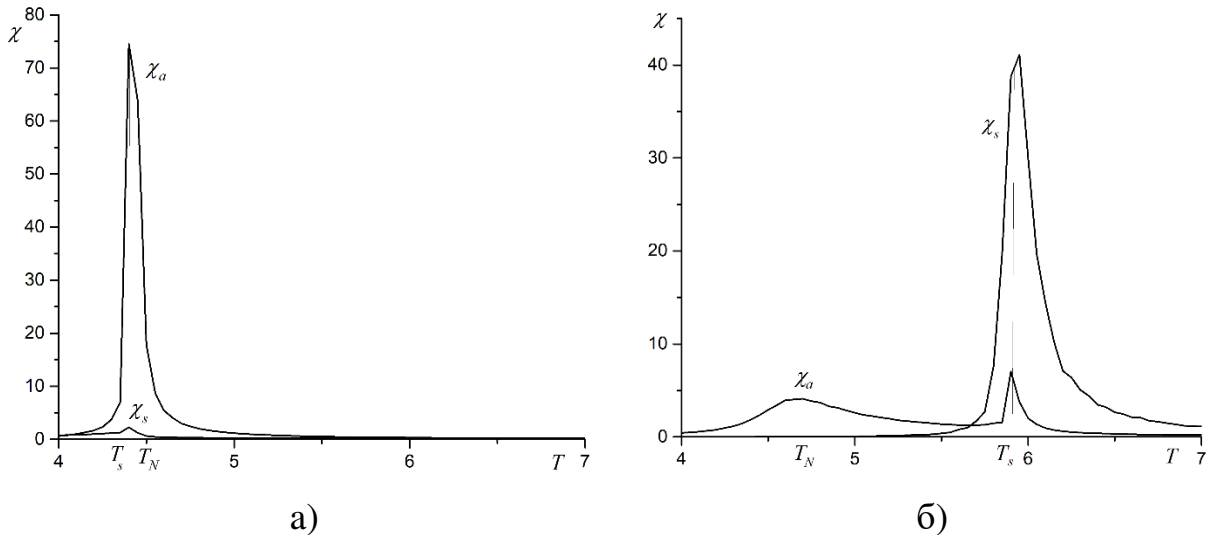


Рисунок 3.17. Зависимости магнитной восприимчивости поверхностного слоя χ_s и основного объема χ от температуры T для пленки толщиной $D = 16$. а) $R = 1.0$, б) $R = 2.5$.

Как и на графиках теплоемкости при $R = 1.0$ оба графика имеют один максимум, соответствующий обычному фазовому переходу. При $R = 2.5$ поверхностная восприимчивость χ_s имеет один максимум, соответствующий поверхностному фазовому переходу T_s . Объемная магнитная восприимчивость χ имеет два максимума, соответствующие поверхностному T_s и экстраординарному T_N фазовым переходам. При поверхностном фазовом переходе происходит воздействие спинов поверхности на первый подповерхностный слой, приводящее к скачку восприимчивости.

3.3.3. Экстраординарный фазовый переход

Экстраординарный фазовый переход, как и специальный фазовый переход, присутствует на фазовой диаграмме при толщине пленки больше шести слоев ($D > 6$). Экстраординарный фазовый переход в тонких пленках отличается от

аналогичного перехода в полубесконечных системах. Для систем с отношением обменных интегралов выше некоторого критического значения R_c ($R > R_c$) упорядочивание поверхностного слоя и основного объема системы происходит при разных температурах. При понижении температуры системы сначала происходит фазовый переход в одноатомном поверхностном слое при температуре T_s (поверхностный фазовый переход), а затем при более низкой температуре T_N ($T_N < T_s$) наблюдается фазовый переход в основном объеме пленки (экстраординарный фазовый переход). Поведение поверхностного m_s и объемного m параметров порядка в зависимости от температуры для пленок разной толщины и отношения констант обменного взаимодействия $R = 2.5$ показаны на рисунке 3.18.

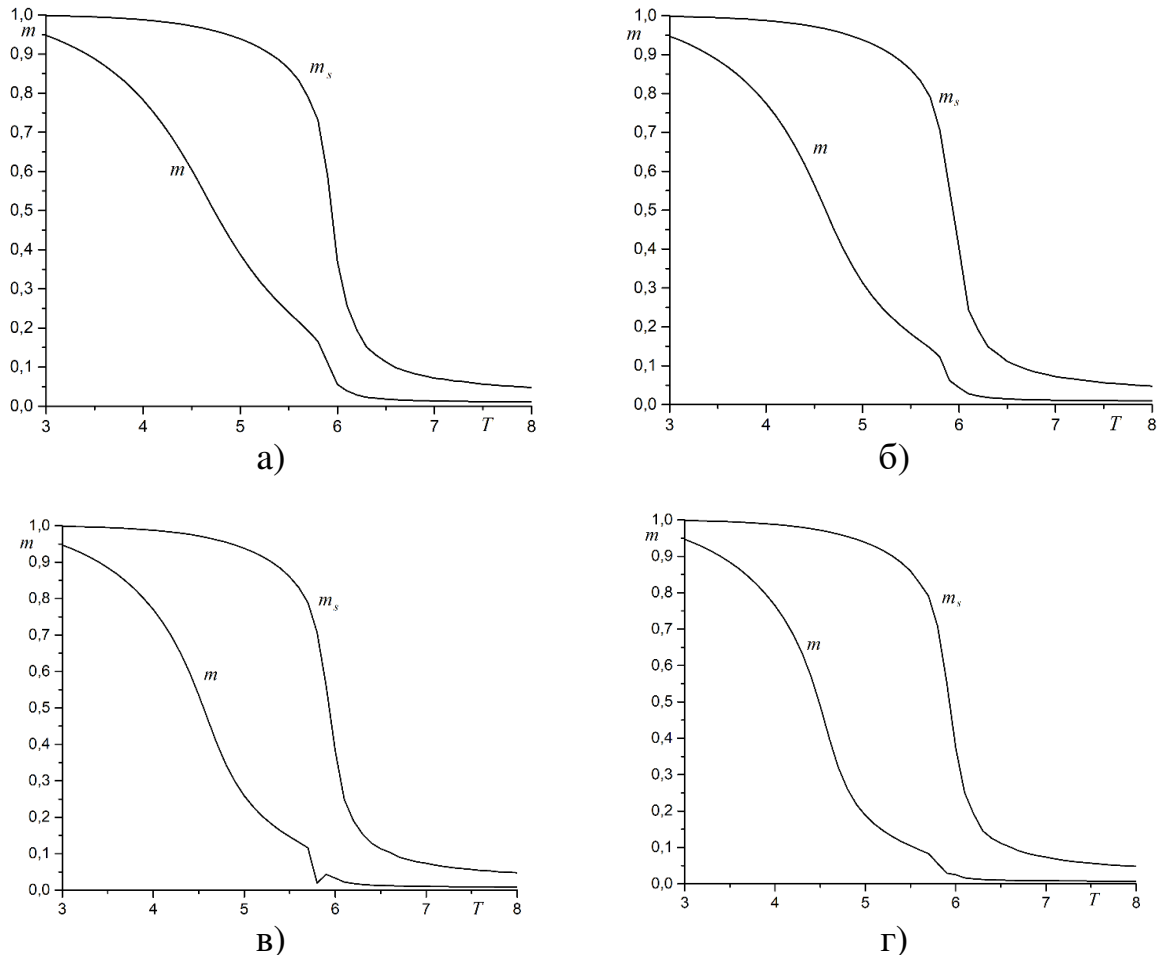


Рисунок 3.18. Зависимость поверхностного m_s и объемного m параметров порядка от температуры T для $R = 2.5$. а) $D = 8$, б) $D = 10$, в) $D = 12$, г) $D = 16$.

Такая последовательность упорядочивания спинов системы влияет на поведение термодинамических функций вблизи экстраординарного фазового

перехода. Упорядоченные спины поверхности оказывают положительное влияние на процессы упорядочивания в основном объеме системы. Две свободные поверхности играют роль внешнего поля, сопряженного с параметром порядка, для спинов в основном объеме системы. Как хорошо известно, внешнее поле приводит к размытию фазового перехода. Такое размытие усложняет точное определение температуры экстраординарного фазового перехода. Из графика на рисунке 3.17(б) видно, что максимумы магнитной восприимчивости являются сглаженными, на них отсутствуют явно выраженные острые пики. Аналогичная картина наблюдается и для пленок другой толщины (Рисунок 3.19).

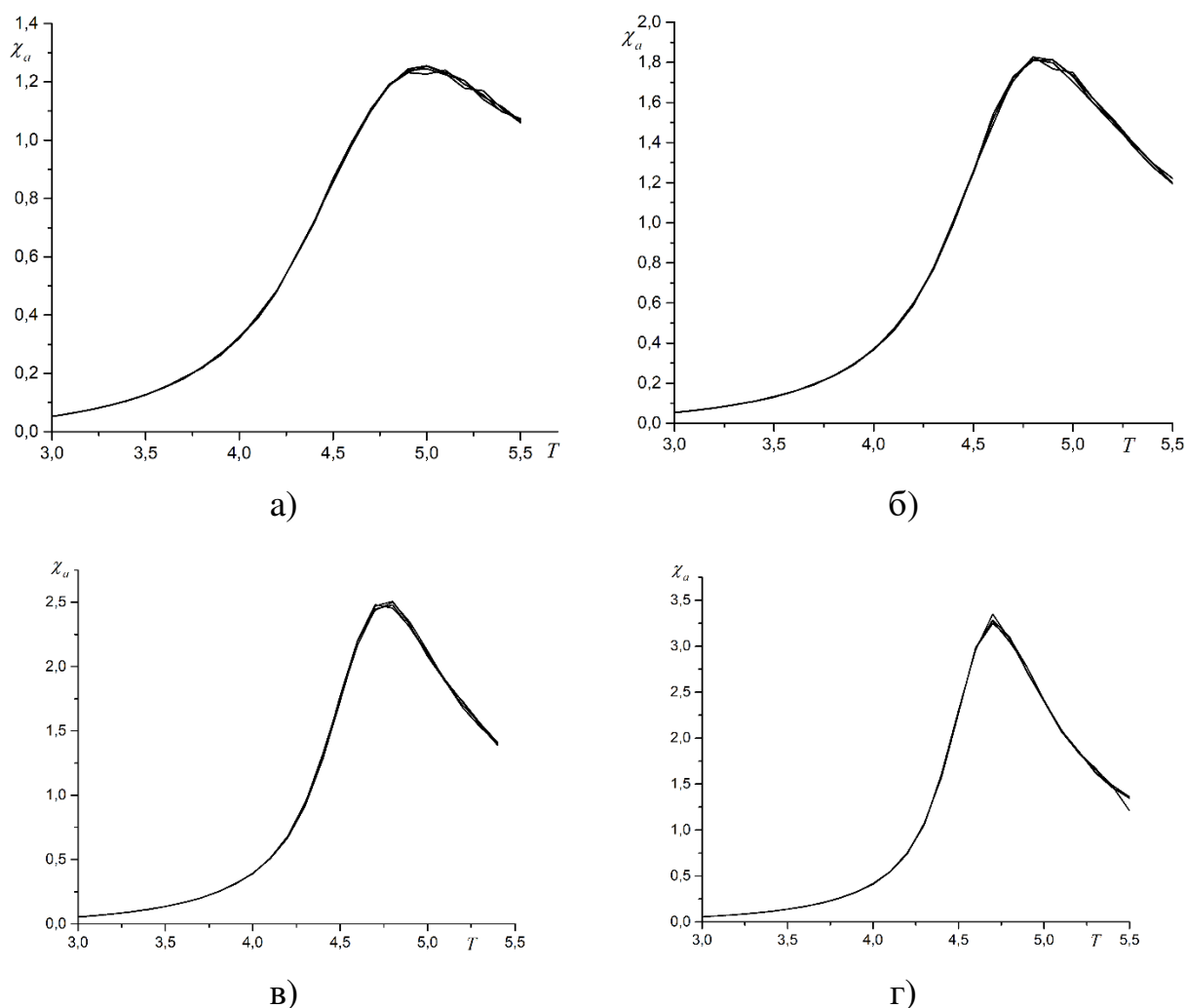


Рисунок 3.19. Зависимости магнитной восприимчивости основного объема χ_a от температуры T для $R = 2.5$. а) $D = 8$, б) $D = 10$, в) $D = 12$, г) $D = 14$.

Отсутствие четко выраженного фазового перехода второго рода сказывается на поведении кумулянтов Биндера для параметра порядка. Отсутствует четко

локализованная точка пересечения графиков их зависимостей от температуры (Рисунок 3.20).

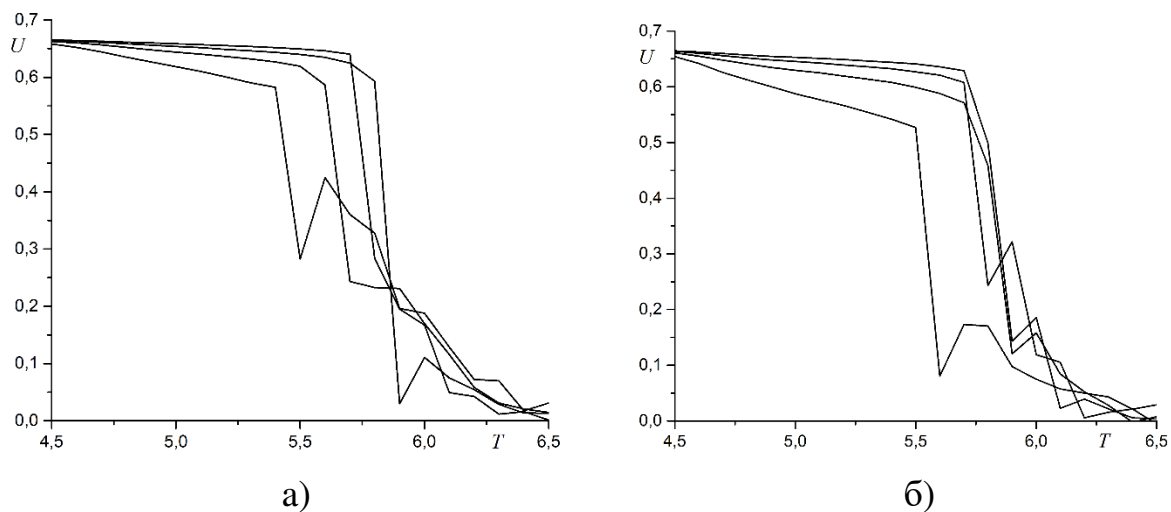
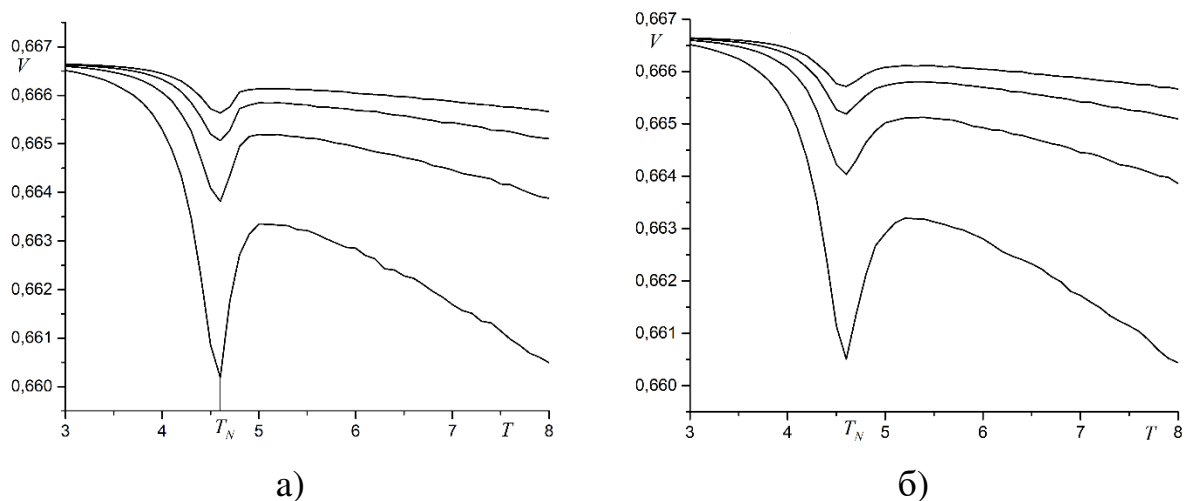


Рисунок 3.20. Зависимости объемных кумулянтов Биндера U от температуры T при $R = 2.5$. а) $D = 12$, б) $D = 16$.

Такое же поведение кумулянтов Биндера наблюдается для фазовых переходов первого рода. Определить температуру фазового перехода и род фазового перехода можно по энергетическим кумулянтам V . Для этих кумулянтов в точке фазового перехода наблюдается минимум (Рисунок 3.21).



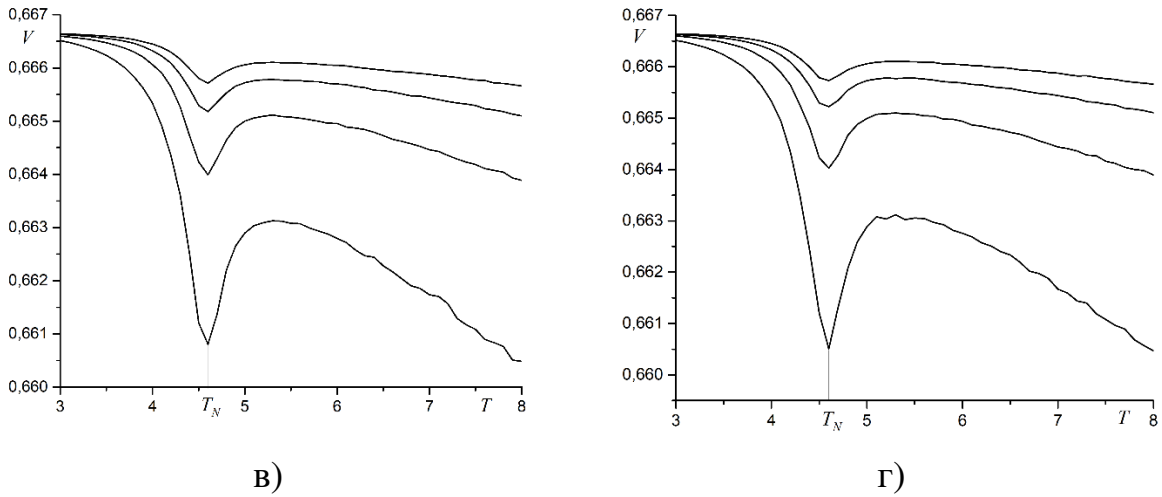


Рисунок 3.21. Зависимости энергетических кумулянтов V от температуры T для пленки толщиной $D = 16$. а) $R = 1.8$, б) $R = 2.2$, в) $R = 2.5$, г) $R = 2.8$.

Род фазового перехода определяется по графику зависимости V от L^{-2} , где L – размер системы. Если точка пересечения данного графика с осью ординат имеет значение $2/3$, то наблюдается фазовый переход второго рода. Примеры таких графиков показаны на рисунке 3.22.

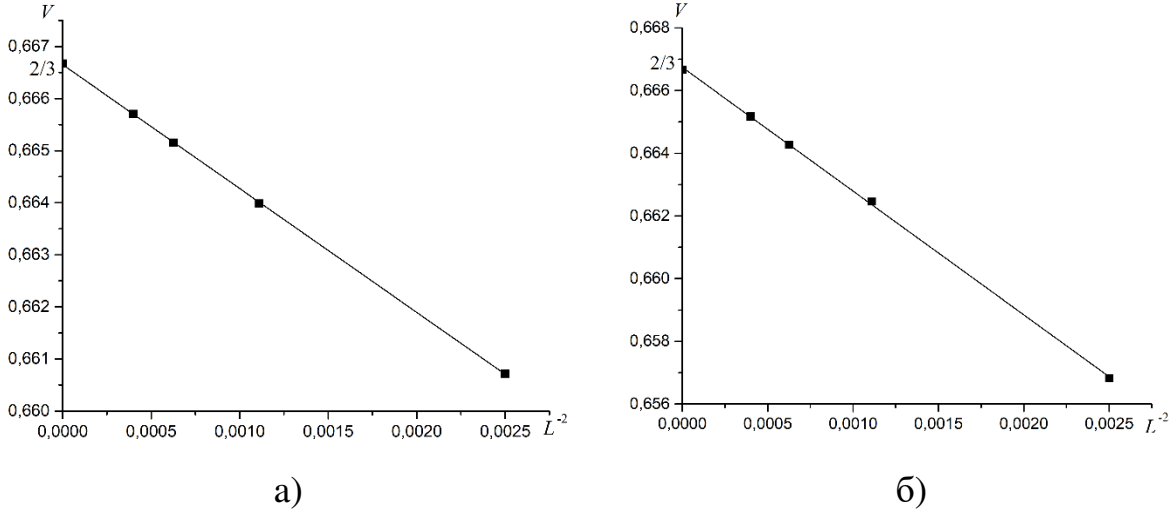


Рисунок 3.22. Зависимости энергетических кумулянтов V в точке фазового перехода от L^{-2} , где L – размер системы. а) $D = 16$, $R = 2.0$, б) $D = 10$, $R = 2.0$.

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.

3.3.4. Специальный фазовый переход

Для тонких пленок с толщиной $D > 6$ при отношении констант обменного взаимодействия выше критического значения ($R > R_c$) наблюдается два фазовых перехода – поверхностный и экстраординарный. При $R < R_c$ в системе происходит только один, обычный фазовый переход. Таким образом на фазовой диаграмме системы присутствует две линии фазовых переходов второго рода и три фазы системы. Эти три линии фазовых переходов пересекаются в одной точке (трикритическая точка). Фазовый переход в трикритической точке принято называть специальным (special phase transition). Положение точки специального фазового перехода на фазовой диаграмме определяется значением R_c . Как показал компьютерный эксперимент R_c зависит от толщины пленки D . График зависимости критического значения отношения констант обменного взаимодействия R_c от толщины пленки D показан на рисунке 3.23.

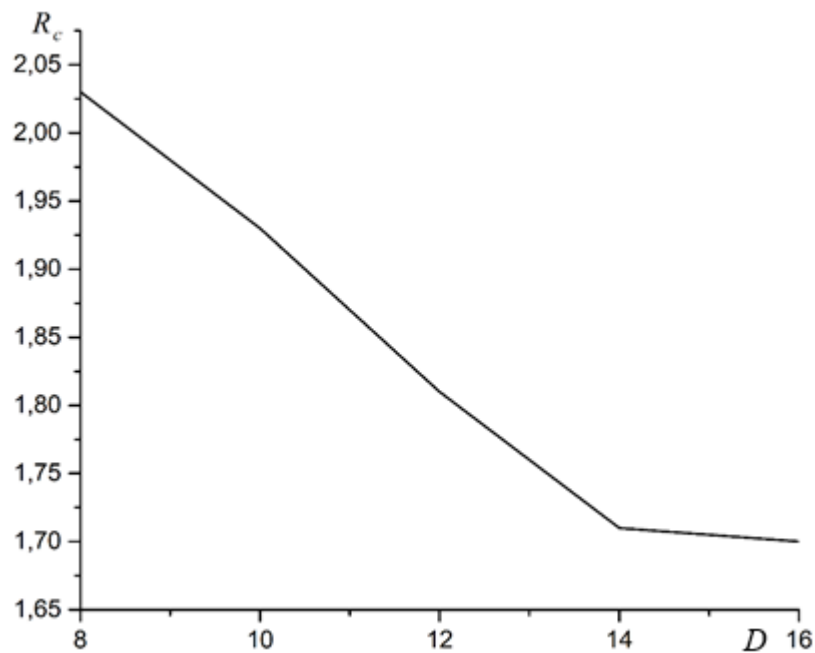


Рисунок 3.23. График зависимости критического значения отношения констант обменного взаимодействия R_c от толщины пленки D .

Как видно из графика 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. Также наблюдается зависимость

температуры специального фазового перехода от толщины пленки, которая представлена на рисунке 3.24.

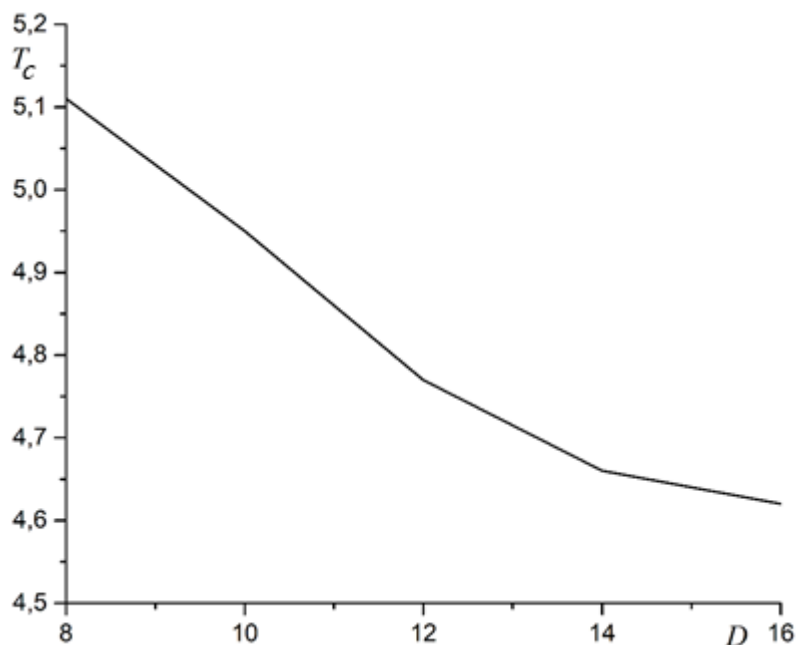


Рисунок 3.24. График зависимости температуры специального фазового перехода T_c от толщины пленки D .

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 $D > 14$.

3.4 Обсуждение результатов

Компьютерное моделирование показало, что в сверхтонких антиферромагнитных пленках не происходит поверхностный фазовый переход. Упорядочивание спинов на поверхности и в основном объеме системе 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.

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 поверхностной энергии обменного взаимодействия превышает некоторое пороговое значение. 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 размытию фазового перехода. Если в пленке происходит поверхностный фазовый переход, то 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, которое зависит от толщины пленки.

Проведем сравнение результатов компьютерного моделирования с реальным экспериментом. В статье [101] приведены значения температуры Нееля для антиферромагнитных пленок MnO на подложке $Ag(001)$. В данной статье температуры вычислялись в относительных единицах. Поэтому необходимо сравнивать отношение экспериментальной температуры Нееля $T_N^{(e)}$ к вычисленной в данной статье температуре поверхностного перехода T_S для одной и той же толщины пленки ($E(D) = T_N^{(e)}(D)/T_S(D)$). Сравнение результатов для пленок толщиной $D = 4, D = 6$ и $D = 10$ показало, что $E(D)$ не зависит от толщины пленки и равно $E(D) = 34.7 \pm 0.2$. Постоянство данного соотношения свидетельствует о хорошем согласии результатов компьютерного моделирования с данными реального эксперимента. Сравнение результатов компьютерного

моделирования с экспериментальными данными позволяет рассчитать значение поверхностной константы обменного взаимодействия для этих эпитаксиальных пленок.

$$J_s = \frac{k_B T_N^{(e)}}{T_s} = k_B E(D) = 3.2 \text{ meV} \quad (3.18)$$

Также для этой системы показано, что при $D = 6$ температура поверхностного фазового перехода превышает температуру Нееля объемного образца ($T_N = 120 \text{ K}$) на $\Delta T = T_s^e - T_N^{(e)} = 23 \text{ K}$. Из этого значения можно определить отношение констант обменного взаимодействия на поверхности пленки и в основном объеме. Учитывая, что для трехмерных систем компьютерное моделирование дает значение $T_N = 4.51$, получаем $T_s = 5.37$, что соответствует значению $R = 2.25$. Такое же значение отношения констант обменного взаимодействия получается на основе сравнения результатов для пленки толщиной $D = 10$. Этот результат говорит о том, что для пленки толщиной $D = 10$ наблюдался поверхностный, а не обычный фазовый переход.

Результаты измерения температуры антиферромагнитного фазового перехода для CoO [23] также показывают значительное превышение температуры фазового перехода в пленке по сравнению с объемным образцом. Температура Нееля объемного образца равна $T_N = 291 \text{ K}$, а для пленки толщиной $D = 10$ моноатомных слоев фазовый переход происходит при $T = 316 \text{ K}$. Расчеты, проведенные в этой статье, показывают, что данный результат должен наблюдаться при $R = 1.9$. Причем для этой пленки, в отличие от MnO происходит обычный фазовый переход. Расчеты поверхностной константы обменного взаимодействия дают значение $J_s = 5.6 \text{ meV}$.

Для эпитаксиальных пленок CrN [14] температура антиферромагнитного фазового перехода практически совпадает с температурой Нееля объемного образца (270K и 273 K соответственно). Это свидетельствует о том, что $R = 1.5$. Если константы обменного взаимодействия совпадают ($R = 1.0$), то температура фазового перехода тонкой пленки ниже температуры Нееля объемного образца. В этом случае также наблюдается обычный фазовый переход.

Отдельно необходимо рассматривать экстраординарный фазовый переход в тонких пленках. В полубесконечных системах характеристики экстраординарного фазового перехода совпадают с обычным фазовым переходом. В эпитаксиальных антиферромагнитных пленках эти два перехода сильно отличаются. Для таких фазовых переходов в ряде работ [154, 171] была предложена модель перехода с логарифмическим ростом радиуса корреляции при приближении к точке фазового перехода. Для обычных фазовых переходов второго рода радиус корреляции растет по степенному закону. Расчеты этой статьи показали, что экстраординарный фазовый переход отличается от обычного фазового перехода. Компьютерное моделирование таких переходов требует доработки модели. Компьютерное моделирование экстраординарного фазового перехода требует отдельного исследования.

3.5 Выводы

На основе исследования критического поведения тонких антиферромагнитных пленок можно сделать следующие выводы:

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. 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 поверхностной энергии обменного взаимодействия превышает некоторое пороговое значение.

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 размытию фазового перехода.

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.

Заключение

В заключении приведем основные результаты, полученные в диссертации.

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 размытию 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. Трушникова Е.В. Исследование фазовых переходов в тонких пленках, описываемых антиферромагнитной моделью Изинга / Трушникова 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.

Объекты интеллектуальной собственности:

1. Программа № 2018616021(73), опубл. 21.05.2018 "Расчет критических индексов полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга методом Монте-Карло", Авторы: Белим С.В., Трушникова Е.В. (21.05.2018).

Список литературы

1. Белим С.В. Критическое поведение неупорядоченных систем со свободной поверхностью. // ЖЭТФ. 2006. Т. 130. № 4. С. 702-714.
2. Белим С.В. Мультикритическое поведение систем со свободной поверхностью. //ЖЭТФ. 2008. Т. 133. № 4. С. 884-891.
3. Белим С.В., Коваль Т.А. Исследование методом Монте-Карло распределения намагниченности в полуограниченных системах при фазовых переходах //ФММ. 2014. Т. 115. № 9. С. 899-905.
4. Белим С.В., Коваль Т.А. Компьютерное моделирование поверхностных фазовых переходов в полуограниченных изинговских магнетиках. //Поверхность. 2015. № 11. С. 14-20.
5. Каганов М.И. Поверхностный магнетизм. //ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 3. С. 1196-1198.
6. Каганов М.И., Карпинская Н.С. Роль поверхностной энергии в фазовом переходе из парамагнитного состояния в ферромагнитное. //ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 6. С. 2143-2157.
7. Камзин А.С., Глянцев Р.Г. Фазовые состояния поверхности и объема кристаллов $Fe_{1-x}Ga_xVO_3$ в области точки Нееля //ФТТ. 2003. Т. 45. № 12. С. 2204-2207.
8. Камзин А.С., Григорьев Л.А. Исследования магнитных свойств поверхности в области температуры Нееля антиферромагнетика Fe_3VO_6 методом мессбауэровской спектроскопии. //Письма в ЖЭТФ. 1993. Т. 57. № 9. С. 538-542.
9. Камзин А.С., Григорьев Л.А. Исследования магнитных свойств поверхности и объема $FeVO_3$ в области температуры Нееля методом одновременной гамма, рентгеновской и электронной мессбауэровской спектроскопии//ФТТ. 1994. Т. 36. № 5. С. 1271-1283.

10. Камзин А.С., Григорьев Л.А. Исследования свойств поверхностных слоев и объема кристалла методами мессбауэровской спектроскопии//Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. № 16. С. 38-41.
11. Камзин А.С., Розенбаум В.Л. Исследования магнитного состояния поверхности гексагональных ферритов Sr-M в области фазового перехода при температуре Кюри //ФТТ. 1999. Т. 41. № 3. С. 468-474.
12. Abragam A., Bleaney B. Electron Paramagnetic Resonance in Transition Metal Ions. – Oxford University Press, 1970. – 911 p.
13. Ahlers G., Kornblit A., Guggenheim H.J. Logarithmic Corrections to the Landau Specific Heat near the Curie Temperature of the Dipolar Ising Ferromagnet LiTbF_4 // Physical Review Letters. 1975. Vol. 34. № 19. p. 1227-1230.
14. Alam, K. Structural and magnetic phase transitions in chromium nitride thin films grown by rf nitrogen plasma molecular beam epitaxy / K. Alam, S.M. Disseler, W.D. Ratcliff et al.// Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 96. – P. 104433.
15. Babaev, A.B. The tricritical point of the site-diluted three-dimensional 5-state Potts model/ A.B. Babaev, A.K. Murtazaev // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2022. – Vol. 563 – P. 169864.
16. Baberschke, K. Higher-order contribution and temperature dependence of the magnetic anisotropy in ultrathin films / K. Baberschke, M. Farle//Journal of applied physics. – 1997. – Vol. 81, № 8. – P. 5038-5043.
17. Baberschke, K. The magnetism of nickel monolayers /K. Baberschke //Applied Physics A. – 1996. – Vol. 62. – P. 417–427.
18. Back, C. H. Experimental confirmation of universality for a phase transition in two dimensions / C. H. Back, C. Wüsch, A. Vaterlaus et al.//Nature. – 1995. – Vol. 378, № 6557. – P. 597–600.
19. Back, C. H. Giant magnetic susceptibility in Fe and Co epitaxial films / C.H. Back, C. Wüsch, D. Kerkmann, D. Pescia// Zeitschrift für Physik B-condensed matter. – 1994. – Vol. 96, № 1. – P. 1–3.
20. Baibich, M. N. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices / M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P.

Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 61, № 21. – P. 2472–2475.

21. Ballesteros, H.G. Critical behavior of the three-dimensional Ising spin glass / H.G. Ballesteros, A. Cruz, L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor, et al. // *Physical Review B.* – 2000. – Vol. 62, № 21. – P. 14237-14245.

22. Bander, M. Ferromagnetism of ultrathin films / M. Bander, D. L. Mills // *Physical Review B.* – 1988. – Vol. 38, № 16. – P. 12015.

23. Barman, S. Influence of finite size and image charge screening on the antiferromagnetic ordering of CoO ultrathin films / S. Barman, A.K. Kundu, K.S.R. Menon// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2020. – Vol. 515. – P. 167292.

24. Bayreuther, G. Quantum oscillations of properties in magnetic multilayers / G. Bayreuther, F. Bensch, V. Kottler // *Journal of applied physics.* – 1996. – Vol. 79, № 8. – P. 4509–4514.

25. Belim, S.V. Computer Modeling of Phase Transitions of Semibounded Antiferromagnets/ S.V. Belim, E.V. Trushnikova // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2018. – Vol. 944. – P. 012011.

26. Bensch, F. Onset of ferromagnetism in Fe epitaxially grown on GaAs(001)(4×2) and (2×6) / F. Bensch, G. Garreau, R. Moosbühler, G. Bayreuther // *Journal of Applied Physics.* – 2001. – Vol. 89, № 11. – P. 7133–7135.

27. Bensch, F. Onset of magnetic anisotropy in epitaxial Fe films on GaAs (001) / F. Bensch, R. Moosbühler, G. Bayreuther//*Journal of applied physics.* – 2002. – Vol. 91, № 10. – P. 8754–8756.

28. Bernal-Villamil, I. Structure and magnetism of the (2×2)-FeO(111) surface/ I. Bernal-Villamil, S. Gallego // *Physical Review B.* – 2016. – Vol. 94. – P. 075431.

29. Binasch, G. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange / G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 39, № 7. – P. 4828–4830.

30. Binder, K. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization / K. Binder // *Physical Review Letters*. – 1981. – Vol. 47, № 9. – P. 693-696.
31. Binder, K. Magnetic surface phenomena/ K. Binder // *Phase transition and critical phenomena*. – 1983. – Vol. 3. – P. 325–331.
32. Bloch, F. Zur Theorie des Ferromagnetismus / F. Bloch // *Zeitschrift für Physik*. – 1930. – Vol. 61. – P. 206–219.
33. Bramwell, S. T. Magnetization and universal sub-critical behaviour in two-dimensional XY magnets / S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1993. – Vol. 5, № 4. – P. L53.
34. Bramwell, S. T. Universality in two-dimensional magnetic systems / S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth // *Journal of applied physics*. – 1993. – Vol. 73, № 10. – P. 6096-6098.
35. Breed, D.J. Magnetic properties of K_2CoF_4 and Rb_2CoF_4 ; two-dimensional Ising antiferromagnets/ D.J. Breed, K. Gilijamse and A.R. Miedema // *Physica*. – 1969. – Vol. 45, № 2. – P. 205–216.
36. Brovko, O.O. Controlling magnetism on metal surfaces with non-magnetic means: electric fields and surface charging / O.O. Brovko, P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa et al. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2014. – Vol. 26. – P. 093001.
37. Bruce, A. D. Coupled order parameters, symmetry-breaking irrelevant scaling fields, and tetracritical points / A. D. Bruce, A. Aharony // *Physical Review B*. – 1975. – Vol. 11, № 1. – P. 478.
38. Bruno, P. Magnetization and Curie temperature of ferromagnetic ultrathin films: The influence of magnetic anisotropy and dipolar interactions / P. Bruno // *MRS Online Proceedings Library (OPL)*. – 1991. – Vol. 231 – P. 299.
39. Bruno, P. Oscillatory Curie temperature of 2D-ferromagnets / P. Bruno, J. Kudrnovský, M. Pajda et al. // *Journal of magnetism and magnetic materials*. – 2002. – Vol. 240, № 1-3. – P. 346–348.

40. Carcia, P. F. Perpendicular magnetic anisotropy in Pd/Co and Pt/Co thin-film layered structures / P. F. Carcia // *Journal of Applied Physics*. – 1988. – Vol. 63. – P. 5066–5073.
41. Classical equilibrium statistical mechanics / C.J. Thompson – Oxford University Press, 1988. – 213 p. – ISBN 9780198519843.
42. Cooke, A.H. Magnetic dipole interactions in dysprosium ethyl sulphate II. Magnetic and thermal properties between 1°K and the Curie point / A.H. Cooke, D.T. Edmonds, C.B.P. Finn, W.P. Wolf // *Proc. of the Royal Soc. of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. – 1968. – Vol. 306, № 1486. – P. 313–334.
43. Cooke, A.H. Magnetic dipole interactions in dysprosium ethyl sulphate I. Susceptibility and specific heat between 20 and 1°K / A.H. Cooke, D.T. Edmonds, F.R. McKim, W.P. Wolf // *Proc. of the Royal Soc. of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. – 1959. – Vol. 252, № 1296. – P. 246.
44. Cowley, R.A. An experimental study of the critical fluctuations in a two-dimensional Ising model / R.A. Cowley, M. Hagan, D.P. Belanger // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. – 1984. – Vol. 17, № 21. – P. 3763–3775.
45. Daniels, J.M. The Effect of Interactions in a Paramagnetic on the Entropy and Susceptibility / J.M. Daniels // *Proceedings of the Physical Society. Section A*. – 1953. – Vol. 66, № 8. – P. 673–688.
46. De Haas, W.J. Paramagnetic Saturation in a Single Crystal / W.J. De Haas, J.V. Handel, C.J. Gorter // *Physical Review*. – 1933. – Vol. 43, № 1. – P. 81.
47. Dho, J. Thickness dependence of perpendicular magnetic anisotropy in $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ films on LaAlO_3 / J. Dho, N. H. Hur // *Journal of magnetism and magnetic materials*. – 2007. – Vol. 318, № 1-2. – P. 23–27.
48. 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. – P. 595–647.
49. Domb, C. On the theory of cooperative phenomena in crystals / C. Domb // *Advances in Physics*. – 1960. – Vol. 9, № 35. – P. 245–361.

50. Dürr, W. Magnetic Phase Transition in Two-Dimensional Ultrathin Fe Films on Au(100) / W. Dürr, M. Taborelli, O. Paul, R. Germar et al.//Physical review letters. – 1989. – Vol. 62. – P. 206.
51. Elliott, R.J. The Magnetic Properties of Certain Rare-Earth Ethyl Sulphates / R.J.Elliott, K.W.H. Stevens // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. – 1953. – Vol. 219, № 1138. – P. 387–404.
52. Elmers, H.J. Ferromagnetic monolayers / H.J. Elmers //International Journal of Modern Physics B. – 1995. – Vol. 9, №. 24. – P. 3115–3180.
53. Elmers, H. J. Critical behavior of the uniaxial ferromagnetic monolayer Fe (110) on W (110) / H. J. Elmers, J. Hauschild, U. Gradmann//Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, № 21. – P. 15224.
54. Elmers, H. J. Critical phenomena in the two-dimensional XY magnet Fe (100) on W (100) / H. J. Elmers, J. Hauschild, G. H. Liu, U. Gradmann//Journal of applied physics. – 1996. – Vol. 79, № 8. – P. 4984–4986.
55. Elmers, H. J. Magnetism and growth in pseudomorphic Fe films on W (100) / H.J. Elmers, J. Hauschild//Surface science. – 1994. – Vol. 320, № 1-2. – P. 134–144.
56. Elmers, H. J. Submonolayer magnetism of Fe(110) on W(110): Finite width scaling of stripes and percolation between islands / H. J. Elmers, J. Hauschild, H. Höche et al //Physical Review letters. – 1994. – Vol. 73, № 6. – P. 898.
57. Erickson, R. P. Anisotropy-driven long-range order in ultrathin ferromagnetic films / R. P. Erickson, D. L. Mills //Physical Review B. – 1991. – Vol. 43, № 13. – P. 11527.
58. Farle, M. Detailed analysis of the in situ magneto-optic Kerr signal of gadolinium films near the Curie temperature / M. Farle, W. A. Lewis, K. Baberschke//Applied physics letters. – 1993. – Vol. 62, № 21. – P. 2728–2730.
59. Farle, M. Thickness-dependent Curie temperature of Gd(0001)/W(110) and its dependence on the growth conditions / M. Farle, K. Baberschke, U. Stetter et al. // Physical Review B. – 1993. – Vol. 47, № 17. – P. 11571.

60. Fink, R. L. Experimental probe for thin-film magnetism in $p(1 \times 1)$ Pd and V on Ag(100) / R. L. Fink, C. A. Ballentine, J. L. Erskine, J. A. Araya-Pochet // *Physical Review B*. – 1990. – Vol. 41, № 14. – P. 10175.
61. Fisher, M.E. The theory of equilibrium critical phenomena / M. E. Fisher // *Reports on Progress in Physics*. 1967. Vol. 30. № 2. P. 615–730.
62. Fisher, M. E. The renormalization group in the theory of critical behavior / M. E. Fisher // *Reviews of Modern Physics*. – 1974. – Vol. 46, № 4. – P. 597.
63. Florczak, J. M. Magnetization reversal in (100) Fe thin films / J. M. Florczak, E. Dan Dahlberg // *Physical Review B*. – 1991. – Vol. 44, № 17. – P. 9338.
64. Frowein, R. Critical thermodynamics of dysprosium ethyl sulphate, a pure dipolar Ising ferromagnet / R. Frowein, J. Kötzler // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter and Quanta*. – 1976. – Vol. 25, № 3. – P. 279–286
65. Frowein R., Kötzler J., Schaub B., Schuster H. G. Crossover to mean-field behavior at marginal dimensionality// *Physical Review B (Condensed Matter)*. – 1982. – Vol. 25, № 7. – P. 4905–4907.
66. Gay, J. G. Spin Anisotropy of Ferromagnetic Films / J. G. Gay and Roy Richter // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 56, № 25. – P. 2728–2731.
67. Gingras M.J.P., den Hertog B.C. Dipolar Interactions and Origin of Spin Ice in Ising Pyrochlore Magnets// *Physical Review Letters*. – 2000. – Vol. 84, № 15. – P. 3430–3433.
68. Giordano N., Wolf W.P. Induced staggered magnetic fields in antiferromagnets: Microscopic mechanisms// *Physical Review B*. – 1980. – Vol. 21, № 5. – P. 2008.
69. Lectures On Phase Transitions And The Renormalization Group / N. Goldenfeld – Westview Press, 1992. – 394 p. – ISBN 978-0201554090.
70. 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.

71. Gradmann, U. Ferromagnetism in the thermodynamically stable monolayer Fe (110) on W (110), coated by Ag / U. Gradmann, M. Przybylski, H. J. Elmers, G. Liu // *Applied Physics A*. – 1989. – Vol. 49 – P. 563–571.
72. Gradmann, U. Flat Ferromagnetic, Epitaxial 48Ni/52Fe(111) Films of few Atomic Layers / U. Gradmann, J. Müller// *Physica Status Solidi B-basic Solid State Physics*. – 1968. – Vol. 27. – P. 313–324.
73. Gradmann, U. Magnetic surface anisotropies / U. Gradmann // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 1986. – Vol. 54-57. – P. 733–736.
74. Gradmann, U. Very Thin (2–200 Å) Ferromagnetic NiFe Films / U. Gradmann, J. Müller// *Journal of Applied Physics*. – 1968. – Vol. 39. – P. 1379–1381.
75. Griffin, J.A. Spontaneous Magnetization at Marginal Dimensionality in LiTbF₄ / J.A. Griffin, J.D. Litster, A. Linz // *Physical Review Letters*. – 1977. – Vol. 38, № 5. – P. 251.
76. Handbook of Magnetic Materials, Volume 07 / editor: K. H. J. Buschow – North-Holland, 1993. – 680 p. – ISBN 9780444898531.
77. Harris, M.J. Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore Ho₂Ti₂O₇ / M.J. Harris, S.T. Bramwell, D.F. McMorrow et al. // *Physical Review Letters*. – 1997. – Vol. 79, № 13. – P. 2554.
78. He, K. Two-dimensional growth of Fe thin films with perpendicular magnetic anisotropy on GaN(0001) / K. He, L.Y. Ma, X.C. Ma, J.F. Jia // *Applied Physics Letters*. – 2006. – Vol. 88, № 23. – P. 232503.
79. Himpsel, F.J. Magnetic nanostructures / F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey, R.F. Willis// *Advances in physics*. – 1998. – Vol. 47, № 4. – P. 511–597.
80. Hoffmann, J. Magnetocaloric Measurements on Dysprosium Phosphate (DyPO₄) / J. Hoffmann // *Physica Status Solidi B*. – 1991. – Vol. 165, № 2. – P. 517–527.
81. Hohenberg, P. C. Existence of long-range order in one and two dimensions / P. C. Hohenberg // *Physical Review*. – 1967. – Vol. 158, № 2. – P. 383.

82. Holmes, L.M. Dipolar and nondipolar interactions in LiTbF_4 / L.M. Holmes, J. Als-Nielsen, H.J. Guggenheim // *Physical Review B (Solid State)*. – 1975. – Vol. 12, № 1. – P. 180–190.
83. *Statistical Mechanics* / K. Huang – Wiley, 1987. – 493 p. – ISBN 9780471859130.
84. Huang, F. Finite-size scaling behavior of ferromagnetic thin films /F. Huang, G.J. Mankey, M.T. Kief, R.F. Willis//*Journal of applied physics*. – 1993. – Vol. 73, № 10. – P. 6760–6762.
85. Huang, F. Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu (100) and Cu (111) / F. Huang, M.T. Kief, G.J. Mankey, R.F. Willis// *Physical Review B*. – 1994. – Vol. 49, № 6. – P. 3962.
86. Hutchings, M.T. Dynamic Critical Neutron Scattering from a Two-Dimensional Ising System Rb_2CoF_4 / M.T. Hutchings, H. Ikeda, E. Janke // *Physical Review Letters*. – 1982. – Vol. 49, № 6. – P. 386–390.
87. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus / E. Ising // *Zeitschrift für Physik*. – 1925. – Vol. 31, № 1. – P. 253–258.
88. Jahn, I.R. Influence of internal strains on the phase diagram of the metamagnet DyPO_4 / I.R. Jahn, J.Ferré, M. Régis, Y. Farge, B.M. Wanklyn // *Solid State Communications*. – 1978. – Vol. 28, № 6. – P. 421–425.
89. Jensen, P.J. Thickness dependence of the magnetization and the Curie temperature of ferromagnetic thin films / P.J. Jensen, H. Dreyssé, K.H. Bennemann // *Surface science*. – 1992. – Vol. 269. – P. 627–631.
90. Johnson, M.T. Magnetic anisotropy in metallic multilayers / M.T. Johnson, P.J.H. Bloemen, F.J.A. den Broeder and J.J. de Vries // *Reports on Progress in Physics*. – 1996. – Vol. 59, № 11. – P. 1409–1458.
91. José, J. V. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model / J.V. José, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, D.R. Nelson // *Physical Review B*. – 1977. – Vol. 16, № 3. – P. 1217.

92. Kadanoff, L.P. Static phenomena near critical points: theory and experiment / L. P. Kadanoff et al. // *Reviews of Modern Physics*. – 1967. – Vol. 39, № 2. – P. 395.
93. Kaupužs, J. Critical exponents predicted by grouping of Feynman diagrams in ϕ^4 model / J. Kaupužs // *Annalen der Physik*. – 2001. – Vol. 513, № 4. – P. 299–331.
94. Kerkmann, D. Two-dimensional magnet at Curie temperature: Epitaxial layers of Co on Cu (100) / D. Kerkmann, D. Pescia, R. Allenspach // *Physical review letters*. – 1992. – Vol. 68, № 5. – P. 686.
95. Koch, R. The intrinsic stress of polycrystalline and epitaxial thin metal films / R. Koch // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1994. – Vol. 6, № 45. – P. 9519.
96. Kohlhepp, J. Power laws of magnetization in ferromagnetic monolayers and the two-dimensional Ising model / J. Kohlhepp, H.J. Elmers, S. Cordes, U. Gradmann // *Physical Review B*. – 1992. – Vol. 45, № 21. – P. 12287.
97. Kosterlitz, J. M. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems / J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. – 1973. – Vol. 6, № 7. – P. 1181–1203.
98. Kosterlitz, J. M. *Progress in Low Temperature Physics, Volume VII* / J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless/ editor: D. F. Brewer – Elsevier, 1978. – P. 371–433 – ISBN 9780444852090.
99. Kosterlitz, J. M. The critical properties of the two-dimensional xy model / J. M. Kosterlitz // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. – 1974. – Vol. 7, № 6. – P. 1046.
100. Krebs, J.J. Properties of Fe single-crystal films grown on (100) GaAs by molecular-beam epitaxy / J.J. Krebs, B.T. Jonker, G.A. Prinz // *Journal of applied physics*. – 1987. – Vol. 61, № 7. – P. 2596–2599.
101. Kundu, A.K. Evolution of surface antiferromagnetic Néel temperature with film coverage in ultrathin MnO films on Ag(001)/ A.K. Kundu, S. Barman, K.S.R. Menon// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2018. – Vol. 466. – P. 186–191.

102. Landau, D.P. Phase Diagrams and Multicritical Behavior of a Three-Dimensional Anisotropic Heisenberg Antiferromagnet/ D.P. Landau, K. Binder // *Physical Review B (Condensed Matter)*. – 1978. – Vol. 17. – P. 2328–2342.
103. Landau, D.P. Magnetic and Thermal Properties of Dysprosium Aluminum Garnet. I. Experimental Results for the Two-Sublattice Phases/ D.P. Landau, B.E. Keen, B. Schneider, W.P. Wolf // *Physical Review B (Condensed Matter)*. – 1971. – Vol. 3, № 7. – P. 2310.
104. Landau, D.P. Finite-size behavior of the Ising square lattice / D.P. Landau// *Physical Review B*. – 1976. – Vol. 13, № 7. – P. 2997.
105. Le Guillou, J.C. Critical Exponents for the n-Vector Model in Three Dimensions from Field Theory / J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin // *Physical Review Letters*. – 1977. – Vol. 39, № 2. – P. 95.
106. Le Guillou, J.C. Magnetization and universal sub-critical behaviour in two-dimensional XY magnets / J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin // *Physical Review B*. – 1980. – Vol. 21, № 9. – P. 3976.
107. Li, Y. Dimensional crossover in ultrathin Ni (111) films on W (110) / Y. Li, K. Baberschke// *Physical review letters*. – 1992. – Vol. 68, № 8. – P. 1208.
108. Lin, C.-Yu., Magnetic interaction between surface-engineered rare-earth atomic spins / C.-Yu. Lin, J.-L. Li, Y.-H. Hsieh et al. // *Physical Review X*. – 2012. – Vol. 2, № 2. – P. 021012.
109. Liu, C. Magnetic properties of ultrathin epitaxial films of iron / C. Liu, S. D. Bader // *Journal of magnetism and magnetic materials*. – 1991. – Vol. 93. – P. 307–314.
110. Liu, C. Two-dimensional magnetic phase transition of ultrathin iron films on Pd (100) / C. Liu, S. D. Bader// *Journal of applied physics*. – 1990. – Vol. 67, № 9. – P. 5758–5760.
111. 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.

112. May, F. Magnetic coupling of Ni, Cu and Co bi-and trilayers probed by magnetic circular X-ray dichroism / F. May, M. Tischer, D. Arvanitis et al. // *Le Journal de Physique IV*. – 1997. – Vol. 7, № C2. – P. C2-389–C2-395.
113. 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.
114. Mermin, N.D. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models / N.D. Mermin, H. Wagner // *Physical Review Letters*. – 1966. – Vol. 17, № 22. – P. 1133.
115. Miedema, A.R. Experiments on simple magnetic model systems / A.R. Miedema, L.J. de Jongh // *Advances in Physics*. – 1974. – Vol. 23, № 1. – P. 1–260.
116. Mills, D.L. Effects in Magnetic Crystals near the Ordering Temperature / D.L. Mills // *Physical Review*. – 1971. – Vol. 3, № 11. – P. 3887–3894.
117. Naganuma, H. Perpendicular magnetic anisotropy of epitaxially grown $L1_0$ -FePdCu nanoparticles with preferential c -axis orientation / H. Naganumaa, K. Sato and Y. Hirotsu // *Journal of Applied Physics*. – 2006. – Vol. 100, № 7. – P. 074914.
118. Nordblad, P. Critical behavior of two-dimensional Rb_2CoF_4 as observed by linear birefringence / P. Nordblad, D.P. Belanger, A.R. King et al. // *Physical Review B (Condensed Matter)*. – 1983. – Vol. 28, № 1. – P. 278–280.
119. O'Connor, D. Effective critical exponents for dimensional crossover and quantum systems from an environmentally friendly renormalization group / D. O'Connor, C.R. Stephens // *Physical review letters*. – 1994. – Vol. 72, № 4. – P. 506.
120. Onsager, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition / L. Onsager // *Physical Review*. – 1944. – Vol. 65, № 3-4. – P. 117.
121. Pajda, M. Oscillatory Curie temperature of two-dimensional ferromagnets / M. Pajda, J. Kudrnovský, I. Turek et al. // *Physical Review Letters*. – 2000. – Vol. 85, № 25. – P. 5424.
122. Palassini, M. Universal Finite-Size Scaling Functions in the 3D Ising Spin Glass / M. Palassini, S. Caracciolo // *Physical Review Letters*. – 1999. – Vol. 82, № 25. – P. 5128–5131.

123. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry, 3rd ed. – Cornell University Press, 1960. – P. 465–468.

124. Phase Transitions. A Brief Account with Modern Applications / M. Gitterman, V. Halpern – World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2004. – 144 p. – ISBN 9789812389039.

125. Pouloupoulos, P. Evidence for domain formation near the Curie temperature in ultrathin Ni/Cu (001) films with perpendicular anisotropy / P. Pouloupoulos, M. Farle, U. Bovensiepen, K. Baberschke // Physical Review B. – 1997. – Vol. 55, № 18. – P. R11961.

126. Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems / V. Privman. – World Scientific Publishing, 1990. – 518 p. – ISBN 9810201087.

127. Przybylski, M. Ferromagnetic order in a Fe(110) monolayer on W(110) by Mössbauer spectroscopy / M. Przybylski, U. Gradmann // Physical review letters. – 1987. – Vol. 59, № 10. – P. 1152.

128. Przybylski, M. Moessbauer spectroscopy near the ferromagnetic monolayer Fe(110) on W(110) / M. Przybylski, U. Gradmann // Le Journal de Physique Colloques. – 1988. – Vol. 49, № C8. – P. C8-1705–C8-1706.

129. Qiu, Z.Q. Magnetic phase transition of ultrathin Fe films on Ag(111) / Z.Q. Qiu, J. Pearson, S.D. Bader // Physical review letters. – 1991. – Vol. 67, № 12. – P. 1646.

130. Qiu, Z.Q. Two-dimensional Ising transition of epitaxial Fe films grown on Ag (100) / Z.Q. Qiu, J. Pearson, S.D. Bader // Physical Review B. – 1994. – Vol. 49, № 13. – P. 8797.

131. Rado, G.T. Magnetoelectric Evidence for the Attainability of Time-Reversed Antiferromagnetic Configurations by Metamagnetic Transitions in DyPO₄ / G.T. Rado // Physical Review Letters. – 1969. – Vol. 23, № 12. – P. 644.

132. Ramirez, A.P. Zero-point entropy in “spin ice” / A.P. Ramirez, A. Hayashi, R.J. Cava et al. // Nature. – 1999. – Vol. 399, № 6734. – P. 333–335.

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

134. Rau, C. Ferromagnetic order and critical behavior at surfaces of ultrathin epitaxial films / C. Rau // *Applied Physics A*. – 1989. – Vol. 49. – P. 579–587.
135. Rau, C. Ferromagnetic order and critical behavior at surfaces of ultrathin V(100) p(1×1) films on Ag(100) / C. Rau, G. Xing, M. Robert // *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*. – 1988. – Vol. 6, № 3. – P. 579–581.
136. Rau, C. Magnetic order and critical behavior at surfaces of ultrathin Fe(100) p(1×1) films on Pd(100) substrates / C. Rau, P. Mahavadi, M. Lu // *Journal of applied physics*. – 1993. – Vol. 73, № 10. – P. 6757–6759.
137. Razee, S. S. A. Local moments and magnetic correlations above the Curie temperature in thin films on and embedded in nonmagnetic substrates: Fe/Cu(100), Co/Cu(100), and Fe/W(100) / S. S. A. Razee, J. B. Staunton, L. Szunyogh, B. L. Györfy // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66, № 9. – P. 094415.
138. Razee, S.S. A. Onset of magnetic order in fcc-Fe films on Cu(100) / S.S. A. Razee, J.B. Staunton, L. Szunyogh, B.L. Györfy // *Physical review letters*. – 2002. – Vol. 88, № 14. – P. 147201.
139. Richter, H. J. The transition from longitudinal to perpendicular recording / H. J. Richter // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2007. – Vol. 40, № 9. – P. R149.
140. Rüdts, C. Absence of dimensional crossover in metallic ferromagnetic superlattices / C. Rüdts, P. Pouloupoulos, J. Lindner et al. // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65, № 22. – P. 220404.
141. Rüdts, C. Oscillatory Curie temperature in ultrathin ferromagnets: experimental evidence / C. Rüdts, A. Scherz, K. Baberschke // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2005. – Vol. 285, № 1-2. – P. 95–100.
142. Ruge, C. Critical parameters for the d = 3 Ising model in a film geometry / C. Ruge, F. Wagner // *Physical Review B*. – 1995. – Vol. 52. – P. 4209–4216.
143. Ruiz-Diaz, P. Tuning Magnetic Anisotropy in Metallic Multilayers by Surface Charging: An Ab Initio Study / P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa, V.S. Stepanyuk // *Physical Review Letters*. – 2013. – Vol. 110. – P. 267203.

144. Ruiz-Diaz, P. Effects of surface charge doping on magnetic anisotropy in capping 3d–5d(4d) multilayers deposited on highly polarizable substrates / P. Ruiz-Diaz, V.S. Stepanyuk // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2014. – Vol. 47. – P. 105006.
145. Schilbe, P. Monte Carlo calculations on the dimensional crossover of thin Ising films / P. Schilbe, S. Siebentritt, K.-H. Rieder// *Physics Letters A*. – 1996. – Vol. 216, № 1-5. – P. 20–25.
146. Schilbe, P. Possible determination of critical exponents from experimental magnetization data of ferromagnetic thin films / P. Schilbe, K.-H. Rieder// *Europhysics Letters*. – 1998. – Vol. 41, № 2. – P. 219.
147. Schneider, B. Non-dipolar interactions in dysprosium aluminum garnet / B. Schneider, D.P. Landau, B.E. Keen, W.P. Wolf // *Physics Letters*. – 1966. – Vol. 23, № 3. – P. 210–212.
148. Schneider, C. M. Curie temperature of ultrathin films of fcc-cobalt epitaxially grown on atomically flat Cu (100) surfaces / C.M. Schneider, P. Bressler, P. Schuster et al. // *Physical review letters*. – 1990. – Vol. 64, № 9. – P. 1059.
149. Srivastava, P. Magnetic moments and Curie temperatures of Ni and Co thin films and coupled trilayers / P. Srivastava, F. Wilhelm, A. Ney et al. // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 58, № 9. – P. 5701.
150. Stampanoni, M. Lack of evidence for ferromagnetism in the vanadium monolayer on Ag (001) / M. Stampanoni, A. Vaterlaus, D. Pescia et al. // *Physical Review B*. – 1988. – Vol. 37, № 17. – P. 10380.
151. Stampanoni, M. Magnetic properties of thin epitaxial films investigated by spin-polarized photoemission / M. Stampanoni // *Applied Physics A*. – 1989. – Vol. 49. – P. 449–458.
152. Stinchcombe, R.B. *Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume VII* / editors: C. Domb, J.L. Lebowitz – Academic Press, 1983. – P. 151–183 – ISBN 9780122203091.
153. Stryjewski, E. *Metamagnetism* / E. Stryjewski, N. Giordano // *Advances in Physics*. 1977. – Vol. 26. – № 5. – P. 487–650.

154. Sun, Y. Quantum extraordinary-log universality of boundary critical behavior / Y. Sun, J.-P. Ly // *Phys. Rev. B* – 2022. – Vol. 106. – P. 224502.
155. Thomassen, J. Magnetic live surface layers in Fe/Cu (100) / J. Thomassen, F. May, B. Feldmann et al. // *Physical review letters*. – 1992. – Vol. 69, № 26. – P. 3831.
156. Ultrathin Magnetic Structures I: An Introduction to the Electronic, Magnetic and Structural Properties / editors: J. A. C. Bland, B. Heinrich. – Springer Berlin, Heidelberg, 1994. – 350 p. – ISBN 9783540219552.
157. Ultrathin Magnetic Structures II: Measurement Techniques and Novel Magnetic Properties / editors: B. Heinrich, J. A. C. Bland. – Springer Berlin, Heidelberg, 1994. – 350 p. – ISBN 9783540219569.
158. Ultrathin Magnetic Structures III: Fundamentals of Nanomagnetism / editors: B. Heinrich, J. A. C. Bland. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. – 318 p. – ISBN 9783540219538.
159. Ultrathin Magnetic Structures IV: Applications of Nanomagnetism / editors: B. Heinrich, J. A. C. Bland. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. – 258 p. – ISBN 9783540271642.
160. Van Vleck J.H. The Influence of Dipole- Dipole Coupling on the Specific Heat and Susceptibility of a Paramagnetic Salt / J.H. Van Vleck // *The Journal of Chemical Physics*. – 1937. – Vol. 5. – P. 320.
161. Vanden Broeck, J.M. A One-Parameter Family of Sequence Transformations / J.M. Vanden Broeck, L.W. Schwartz // *Journal on Mathematical Analysis*. – 1979. – Vol. 10, № 3. – P. 658–666.
162. Vendruscolo M. Magnetic-phase transitions of Ising surfaces with modified surface-bulk coupling: A Monte Carlo study / M. Vendruscolo, M. Rovere, A. Fasolino // *Europhysics Letters*. – 1992. – Vol. 20. – P. 547–552.
163. Vollmer, R. Dependence of the Curie temperature on the Cu cover layer in x-Cu/Fe/Cu(001) sandwiches / R. Vollmer, S. van Dijken, M. Schleberger, J. Kirschner // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 61, № 2. – P. 1303.

164. Wastlbauer, G. Structural and magnetic properties of ultrathin epitaxial Fe films on GaAs (001) and related semiconductor substrates / G. Wastlbauer, J. A. C. Bland// *Advances in physics*. – 2005. – Vol. 54, № 2. – P. 137–219.

165. Wegner, F. Spin-ordering in a planar classical Heisenberg model / F. Wegner // *Zeitschrift für Physik*. – 1967. – Vol. 206, № 5. – P. 465–470.

166. Winkelmann, A. Perpendicular Magnetic Anisotropy Induced by Tetragonal Distortion of FeCo Alloy Films Grown on Pd(001) / A. Winkelmann, M. Przybylski, F. Luo, Y. Shi, J. Barthel // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 96, № 25. – P. 257205.

167. Wolf, W.P. Anisotropic interactions between magnetic ions / W.P. Wolf // *Journal de Physique Colloques*. – 1971. – Vol. 32, № C-1. – P. C1-26–C1-33.

168. Wright, J.C. DyPO₄: A Three-Dimensional Ising Antiferromagnet / J.C. Wright, H.W. Moos, J.H. Colwell et al. // *Physical Review B*. – 1971. – Vol. 3, № 3. – P. 843–858.

169. Xu, Y.B. Evolution of the ferromagnetic phase of ultrathin Fe films grown on GaAs (100)-4×6 / Y.B. Xu, E.T.M. Kernohan, D.J. Freeland et al. // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 58, № 2. – P. 890.

170. Zakeri, K. Correlation between structure and magnetism in epitaxial Fe monolayers on GaAs (001) / K. Zakeri, T. Kebe, J. Lindner, M. Farle// *Superlattices and Microstructures*. – 2007. – Vol. 41, № 2-3. – P. 116–121.

171. Zhang, L.-R. Surface criticality of the antiferromagnetic Potts model / L.-R. Zhang, C. Ding, Y. Deng, L. Zhang// *Phys. Rev. B* – 2022. – Vol. 105. – P. 224415.