

Симакова Софья Сергеевна

**ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ  
ПЛЕНОК МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Омск - 2026

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

Научный руководитель: **Тихомиров Илья Викторович**, кандидат физико-математических наук, доцент ФГАОУ ВО «Омский государственный технический университет», г. Омск

Официальные  
оппоненты: **Вахитов Роберт Миннисламович**, доктор физико-математических наук, профессор ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа  
**Мамонова Марина Владимировна**, кандидат физико-математических наук, доцент ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», г. Омск

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук

Защита состоится 25 сентября 2026 г. в 11:00 на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129, конференц зал.

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

Автореферат разослан « \_\_\_ » \_\_\_\_\_ г.

учёный секретарь

диссертационного совета 24.2.431.01,

кандидат физико-математических наук

Матюнина М.В.

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

## Актуальность темы исследования

Тонкие ферромагнитные пленки служат основой элементной базы устройств спиновой электроники (спинтроники) [1]. Для управления потоком электронов в элементах спинтроники используется эффект гигантского магнитосопротивления. Тонкие ферромагнитные пленки используются как для создания спинполяризованного тока, так и для спиновой фильтрации потока электронов [2]. В связи с чем актуальной является задача управления магнитными свойствами тонких пленок. Основным преимуществом тонких пленок являются низкие коэрцитивная сила и энергия перемагничивания, что позволяет управлять их состоянием с помощью слабых магнитных полей [3, 4]. Тонкие пленки используются преимущественно в составе сэндвич-систем. Для такой многослойной системы необходимо использовать пленки с различными магнитными свойствами [1]. Изменение магнитных свойств может достигаться выбором материалов, влиянием на подложку и созданием геометрических наноструктур [5, 6].

Регулярная решетка наноразмерных пор, которые принято называть антиточками (antidots), в тонкой пленке является одной из наиболее распространенных наноструктур [7]. При этом поры расположены в узлах прямоугольной или шестиугольной сетки. Такие наноструктуры формируются либо на этапе напыления пленки [7, 8], либо после ее создания с помощью травления [7, 9]. Экспериментальные исследования показывают, что изменение параметров решетки пор влияет на магнитные свойства ферромагнитной пленки: происходит сдвиг температуры Кюри, влияющий на общую намагниченность пленки, а также изменяются коэрцитивная сила и энергия перемагничивания [10]. Причем в различных материалах ширина петли гистерезиса может как увеличиваться, так и уменьшаться. Создание решетки антиточек в ферромагнитных пленках позволяет управлять их магнитными свойствами изменяя только геометрические параметры системы: форму и размер пор, период и форму решетки [10, 11]. В связи с тем, что решетка пор обладает несколькими геометрическими параметрами, изменяющимися

в широких пределах, экспериментальное изучение таких наноструктурированных пленок требует больших затрат. и актуальной является задача их компьютерного моделирования. Такое моделирование позволит выявить общие закономерности изменения магнитных свойств пленки при изменении геометрических параметров решетки пор.

Метод Монте-Карло хорошо зарекомендовал себя в моделировании магнитных свойств спиновых систем, позволяющим исследовать как фазовые переходы, так и процесс перемагничивания в ферромагнитной фазе [12, 13]. Результаты компьютерного моделирования будут актуальны при разработке и проектировании устройств спинтроники.

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

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

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

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

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

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

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

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

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

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

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

## **Научная новизна**

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

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

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

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

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

## **Соответствие диссертации паспорту специальности**

Диссертационная работа соответствует пункту 5 Паспорта специальности 1.3.3 «Теоретическая физика»: «Теория конденсированного состояния. Изучение различных состояний вещества и физических явлений в них. Статистическая физика. Теория фазовых переходов. Физическая кинетика».

## **Практическая и научная значимость результатов**

Научная и практическая значимость результатов состоит в теоретическом исследовании магнитных свойств ферромагнитных пленок с регулярной решеткой

пор, определении зависимости намагниченности и коэрцитивной силы от периода решетки и размера пор. Результаты исследования позволяют выявить общие закономерности влияния упорядоченного массива пор на магнитные свойства ферромагнитных пленок и найти им применение в процессе проектирования и изготовления устройств спинтроники.

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

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

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

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

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

**Личный вклад автора:** Все публикации выполнены в соавторстве с научным руководителем Тихомировым И.В., а также Белимом С.В. и Бычковым И.В. Формулировка цели исследования и постановка задач исследования выполнены

совместно с научным руководителем. Разработка программного комплекса для расчетов, компьютерный эксперимент, обработка его результатов и сравнение с данными реальных экспериментов выполнены соискателем лично. Обсуждение результатов компьютерного моделирования и написание научных статей выполнено совместно с соавторами.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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

**В первой главе** приведен обзор литератур по методам компьютерного моделирования критического поведения спиновых систем. Рассмотрены основы метода Монте-Карло, алгоритма Метрополиса и модель Изинга. Рассматриваются экспериментальные результаты по изучению свойств тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиоточек.

**Во второй главе** исследуются магнитные фазовые переходы в тонких ферромагнитных пленках с решеткой антиоточек. Рассматриваются тонкие ферромагнитные плёнки толщиной в  $D$  моноатомных слоёв (ML). Атомы располагаются в узлах кубической кристаллической решётки, линейные размеры плёнки составляют  $L \times L \times D$  атомов, к пленке применены периодические граничные условия. На плёнке размещается регулярная квадратная решётка с периодом  $d$  атомов, в узлах которой находятся сквозные поры с линейными размерами  $a \times a$  атомов. Система описывается моделью Изинга, её гамильтониан в относительных единицах  $H$  выражается следующим образом:

$$H = \frac{H_0}{J} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{\mu_B h_0}{J} \sum_i S_i. \quad (1)$$

Здесь  $J$  – обменный интеграл спинов пленки,  $h_0$  – напряженность внешнего магнитного поля,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Поры моделируются с помощью атомов с нулевым спином. Температура системы  $T$  также рассчитывается в относительных

единицах  $T = k_B t / J$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана, а  $t$  – термодинамическая температура. Роль параметра порядка играет намагниченность системы  $m$ :

$$m = \left( \sum_{i,j=1}^L S_{ij} \right) / N \quad (2)$$

Здесь  $N$  – количество ненулевых спинов в системе. Для формирования спиновых конфигураций использовался алгоритм Метрополиса и теория конечномерного скейлинга.

Наличие решётки антиточек меняет температуру фазового перехода системы в сравнении со сплошной плёнкой (Рис. 1). Это обосновано уменьшением общего числа спинов в системе и одновременным увеличением площади поверхностного слоя, который проходит по всем внутренним границам антиточек. Температура фазового перехода нелинейно растёт с увеличением периода решётки антиточек и стремится к значению, характерному для сплошной тонкой плёнки. Основное влияние на температуру Кюри оказывает площадь свободной поверхности. Для значения периодов решетки, при которых вклад внутренней поверхности отверстий в суммарное количество спинов системы не превышает порог в 0.25, зависимость температуры Кюри может быть аппроксимирована логарифмической функцией.

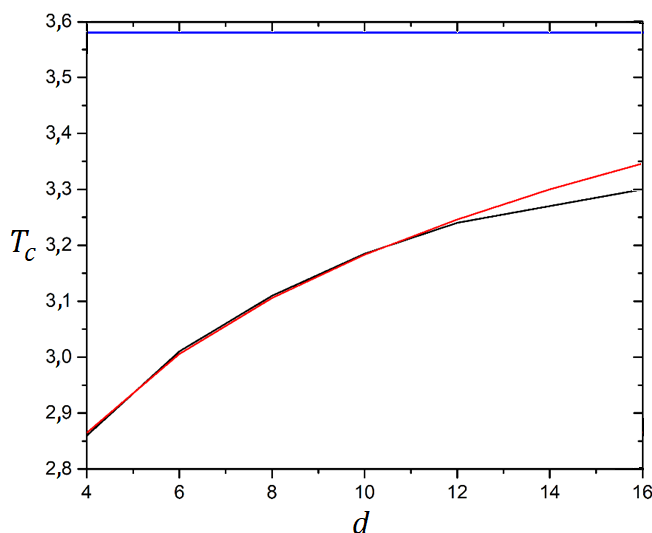


Рисунок 1 – Зависимость  $T_c$  от периода решётки антиточек при размере поры  $a = d/2$ .

Чёрным показан результат компьютерного моделирования, красным изображена аппроксимация логарифмической функцией, синим отмечена температура Кюри для непрерывной плёнки.

Данная закономерность выполняется в том числе для антиточек разной формы. Было показано, что введение пор треугольной формы вызывает небольшое снижение критической температуры системы  $T_C$  в сравнении системами с квадратными порами того же объёма. Это связывается с неравномерной толщиной стенок между антиточками. Магнитные свойства системы зависят от формы и размеров отверстий. Период решетки оказывает сильное влияние на температуру Кюри, если размеры отверстий увеличиваются пропорционально периоду решетки антиточек, то температура фазового перехода растет по логарифмическому закону. Если размеры отверстий остаются постоянными, то рост температуры фазового перехода более быстрый. Во всех случаях температура Кюри стремится к значению для непрерывной пленки.

Исследовано влияние наличия случайных смещений положения пор от узлов решетки (Рис. 2). Было показано, что такие флуктуации не влияют на характер зависимости температуры фазового перехода. Зависимость критических индексов от размера пор носит ступенчатый характер. Если площадь пор меньше 50% площади пленки, то критические экспоненты совпадают с критическими экспонентами однородной тонкой пленки. Если площадь пор не менее 50% площади пленки, то в системе наблюдается новый режим критического поведения. Это связано с тем, что по своей геометрии система перестаёт быть плёнкой с набором дефектов, а приближается к сетке из неравномерных по толщине нанопроволок.

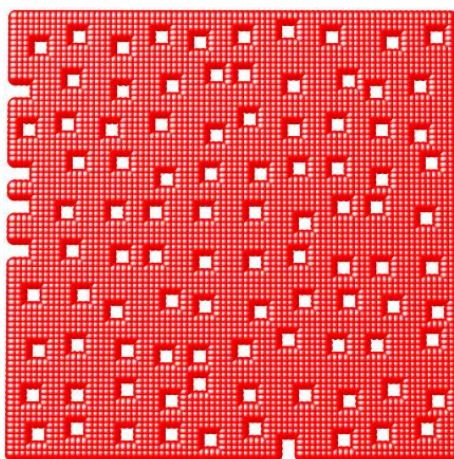


Рисунок 2 – Пример плёнки со случайным расположением отверстий для периода решётки  $d = 8$  и размера отверстий  $a = 4$ .

Решетка антиточек оказывает влияние на процесс перемангничивания тонких ферромагнитных пленок. Наличие решётки антиточек на плёнке не влияет на форму петли гистерезиса, но меняет её ширину. С увеличением периода решётки растёт ширина петли. Это связано с тем, что с увеличением периода уменьшается площадь поверхности, приходящейся на один спин системы. Зависимость коэрцитивной силы от периода имеет нелинейный характер (Рис. 3(а)).

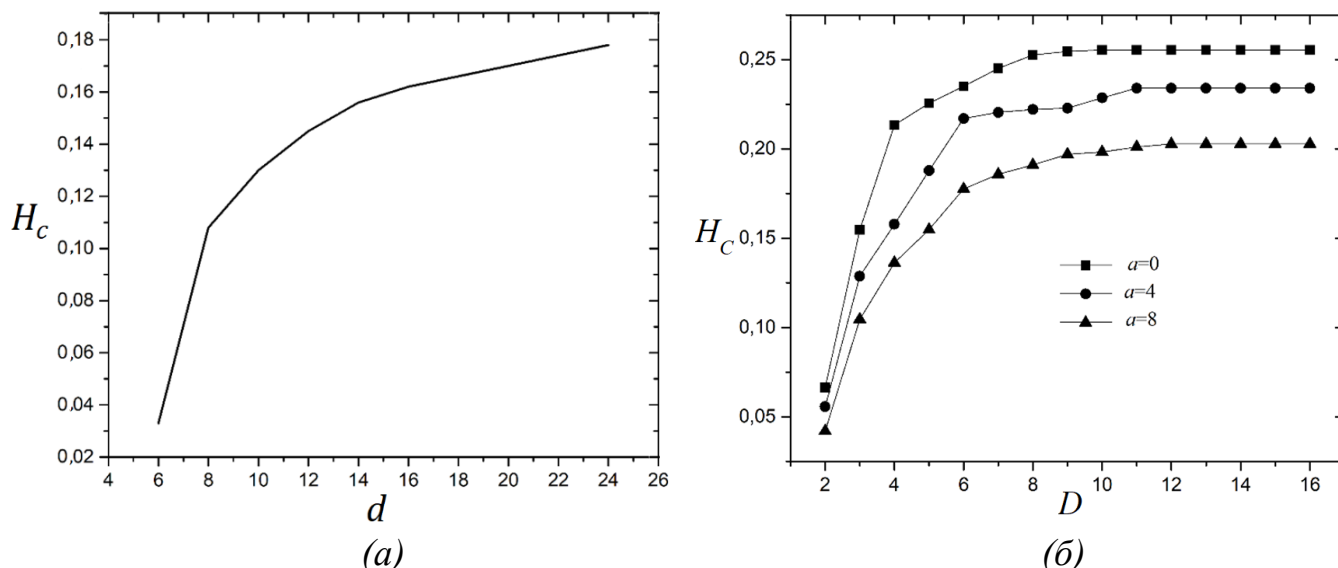


Рисунок 3 – Зависимость коэрцитивной силы  $H_c$ : а) от периода решётки антиточек для  $a = 4$  б) от толщины пленки  $D$  для сплошной плёнки ( $a = 0$ ) и пленок с массивом пор, имеющих линейные размеры  $a = 4$  и  $a = 8$ .

Также на коэрцитивную силу влияет толщина плёнки с решеткой антиточек, наблюдается нелинейный рост с увеличением толщины плёнки. Начиная с толщины  $D = 12 ML$  коэрцитивная сила выходит в насыщение, при этом увеличение размера пор снижает её максимальное значение (Рис. 3(б)).

**В третьей главе** исследуются фазовые переходы в тонких бислойных пленках с решеткой антиточек. Модель представляет собой тонкую плёнку из двух слоёв, расположенную на плоскости ОХУ. Нижний слой выполнен из магнитотвёрдого материала, характеризующегося обменным интегралом  $J_1$ , имеет толщину  $D_1$ , и ограничен плоскостями  $z = 0$  и  $z = D_1 - 1$ . Верхний слой выполнен из магнитомягкого материала, характеризующегося обменным интегралом  $J_2 < J_1$ , имеет толщину  $D_2$ , и ограничен плоскостями  $z = D_1$  и  $z = D_1 + D_2 - 1$ . Спины расположены в кубической кристаллической решётке, в узлах квадратной решетки с

периодом  $d$  расположены поры размерами  $a \times a$  атомов, линейные размеры плёнки составляют  $L \times L \times (D_1 + D_2)$  атомов. Гамильтониан бислойной структуры в модели Изинга в относительных единицах содержит слагаемые, описывающие взаимодействия внутри каждого из слоёв, взаимодействие между слоями с использованием правила Лоренцо-Бертло и взаимодействие системы с внешним магнитным полем:

$$H = \frac{H_0}{J_1} = - \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ 0 \leq z_1, z_2 < D_1}} S_i(z_1) S_j(z_2) - R \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ D_1 \leq z_1, z_2 < D_1 + D_2}} S_i(z_1) S_j(z_2) - \sqrt{R} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ z_1 = D_1 - 1, z_2 = D_1}} S_i(z_1) S_j(z_2) + \mu_B h \sum_i S_i(z_1) \quad (3)$$

Здесь  $h_0$  – напряженность внешнего магнитного поля,  $h = h_0/J_1$  – напряженность в относительных единицах,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Поры моделируются с помощью атомов с нулевым спином. Температура системы в относительных единицах  $T = k_B t/J$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана, а  $t$  – термодинамическая температура. Для упрощения анализа влияния значения обменных интегралов вводится их отношение:  $R = J_2/J_1 < 1$ .

Для анализа процессов, происходящих в бислойной плёнке, и оценки влияния слоёв друг на друга все термодинамические параметры и важные величины, как кумулянты Биндера, вычислялись отдельно для магнитотвёрдого, магнитомягкого слоёв, и для всей плёнки в целом. Примером может служить подсчитываемые величины намагниченности, которые служили параметрами порядка:

$$m_1 = \left( \sum_{0 \leq z < D_1} S_i(z) \right) / (L^2 D_1); \quad m_2 = \left( \sum_{D_1 \leq z < D_1 + D_2} S_i(z) \right) / (L^2 D_2); \quad (4)$$

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

В данной работе рассматриваются тонкие бислойные плёнки с решёткой антиоточек, в которых фиксированы толщина магнитотвёрдого слоя  $D_1 = 8 ML$  и размер отверстий в плёнке  $a = 2$  спина. Рассматривались бислойные плёнки с

толщиной магнитомягкого слоя от  $D_2 = 2 ML$  до  $D_2 = 8 ML$  с шагом  $\Delta D_2 = 2 ML$ . Размеры системы изменялись от  $L = 32$  до  $L = 96$  с шагом  $\Delta L = 16$ . Отношение обменных интегралов варьировалось от  $R = 0.4$  до  $R = 0.8$  с шагом  $\Delta R = 0.1$ . Период решетки антиточек принимал значения:  $d = 4, d = 8, d = 16$ .

Для каждой конфигурации выполнялось вычисление температур фазовых переходов в каждом из слоёв и во всей плёнке совокупно. Было выявлено, что температура фазового перехода в бислойной плёнке не зависит от толщины магнитомягкого слоя и совпадает с температурой Кюри магнитотвёрдого слоя. Эта закономерность наблюдается как для сплошной плёнки, так и для плёнок с решётками антиточек. Как и в случае монослойной плёнки, температура Кюри нелинейно растёт с увеличением периода решётки антиточек и стремится к значению, характерному для сплошной плёнки (Рис. 4).

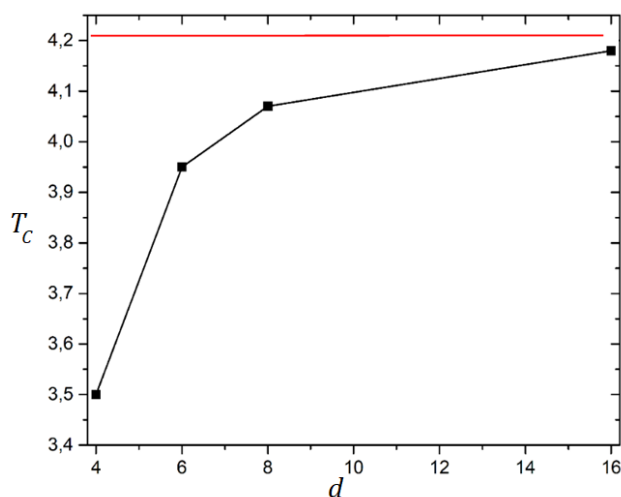


Рисунок 4 – График зависимости температуры фазового перехода  $T_c$  бислойной пленки от периода решетки антиточек. Красной линией показана температура непрерывной пленки без решетки антиточек.

Для моделирования процесса перемангничивания плёнки расчёты выполнялись при температуре  $T = 2.5$ , это обеспечивает нахождение в ферромагнитной фазе обоих слоёв плёнки. Магнитное поле изменялось от  $h = 0.5$  до  $h = -0.5$  спинов с шагом в  $\Delta h = 0.05$ . В начале исследовалось поведение в магнитном поле сплошной бислойной плёнки. Отношение обменных интегралов варьировалось от  $R = 0.4$  до  $R = 0.8$  с шагом  $\Delta R = 0.1$ .

Магнитомягкая составляющая пленки искажает петлю гистерезиса, пример такого искажения приведён на рисунке 5.

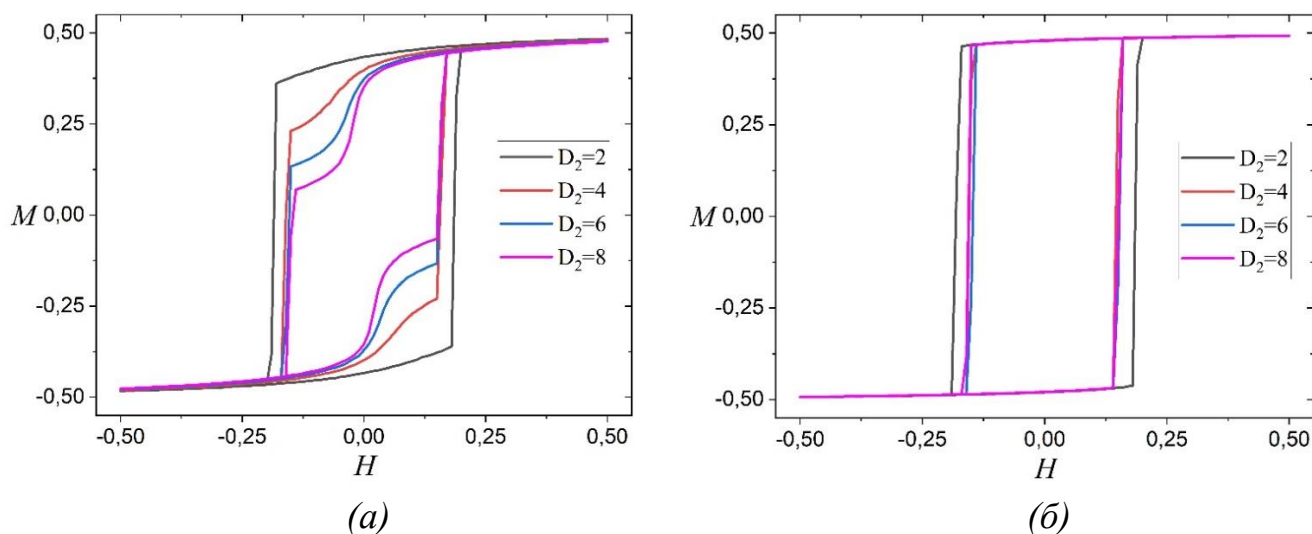


Рисунок 5 – Петли гистерезиса для пленок с различной толщиной магнитомягкого слоя  $D_2$ , отношением обменных интегралов  $R$  и периодом решетки антиточек  $d$ : а)  $R = 0.4, a = 2, d = 16$ , б)  $R = 0.8, a = 2, d = 16$ .

Однако данный эффект наблюдается только при значительном отличии обменных интегралов слоёв  $R < 0,5$  как для сплошной, так и для пористой плёнки. Увеличение числа пор уменьшает это искажение.

Зависимость коэрцитивной силы в бислойных пленках от отношения обменных интегралов составляющих ее слоев имеет четко выраженный минимум (Рис. 6(a)). Минимальная коэрцитивная сила наблюдается при отношении обменных интегралов в интервале  $0,6 \leq R \leq 0,7$ . Минимум присутствует для пленок с любым периодом решетки антиточек и любой толщиной магнитомягкого слоя. Увеличение количества антиточек на единицу площади снижает коэрцитивную силу (Рис. 6(б)). При увеличении отношения обменных интегралов уменьшается различие между магнитным поведением слоёв плёнки. Поле, необходимое для перемагничивания магнитомягкого слоя растёт, а значит уменьшается его влияние на магнитотвердую плёнку, что приводит к увеличению коэрцитивной силы. При сильном уменьшении значения отношения обменных интегралов уменьшается поле, необходимое для перемагничивания магнитомягкого слоя.

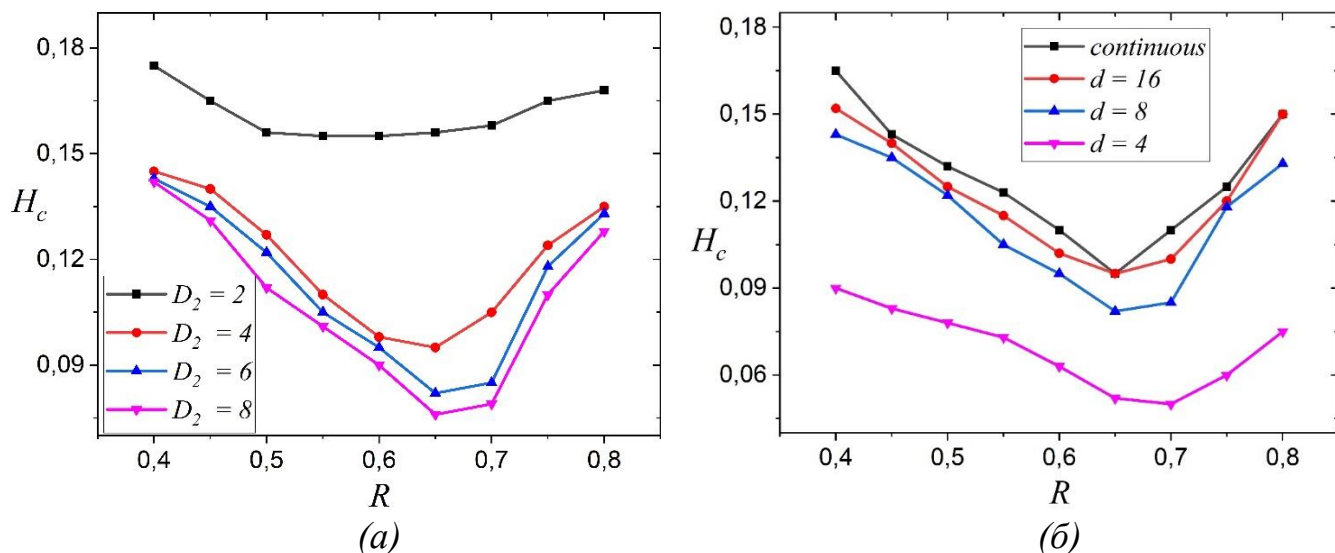


Рисунок 6 – Графики зависимости коэрцитивной силы  $H_c$  от отношения обменных интегралов  $R$ : а) для сплошной пленки и пленки с периодом решетки антиточек  $d = 8$  при различной толщине магнитомягкой составляющей  $D_2$ , б) для пленок с толщиной магнитомягкого слоя  $D_2 = 6 ML$  и различным периодом решетки антиточек.

При этом происходит последовательное перемагничивание сначала магнитомягкой, а затем магнитотвёрдой плёнки, при котором возникает «ступенька» в петле гистерезиса (Рис. 5). При этом влияние на интерфейсе становится недостаточным для уменьшения коэрцитивной силы. Совокупность описанных явлений объясняет наличие минимума рассматриваемой зависимости.

Энергия перемагничивания плёнки пропорциональна площади петли гистерезиса. Для петель гистерезиса правильной формы без искажений данная величина пропорциональна величине коэрцитивной силы. Однако с добавлением магнитомягкого слоя и решетки антиточек, форма петли искажается. При чём искажения увеличиваются неравномерно с изменением периода решётки и толщины магнитомягкого слоя. На графике зависимости энергии перемагничивания бислойных пленок от отношения обменных интегралов слоев наблюдается четко выраженный минимум (Рис. 7(а)). Минимальная энергия перемагничивания наблюдается при отношении обменных интегралов в интервале  $0,6 \leq R \leq 0,7$ . Энергия перемагничивания уменьшается при увеличении толщины магнитомягкого слоя. Увеличение количества антиточек на единицу площади существенно снижает энергию перемагничивания (Рис. 7(б)).

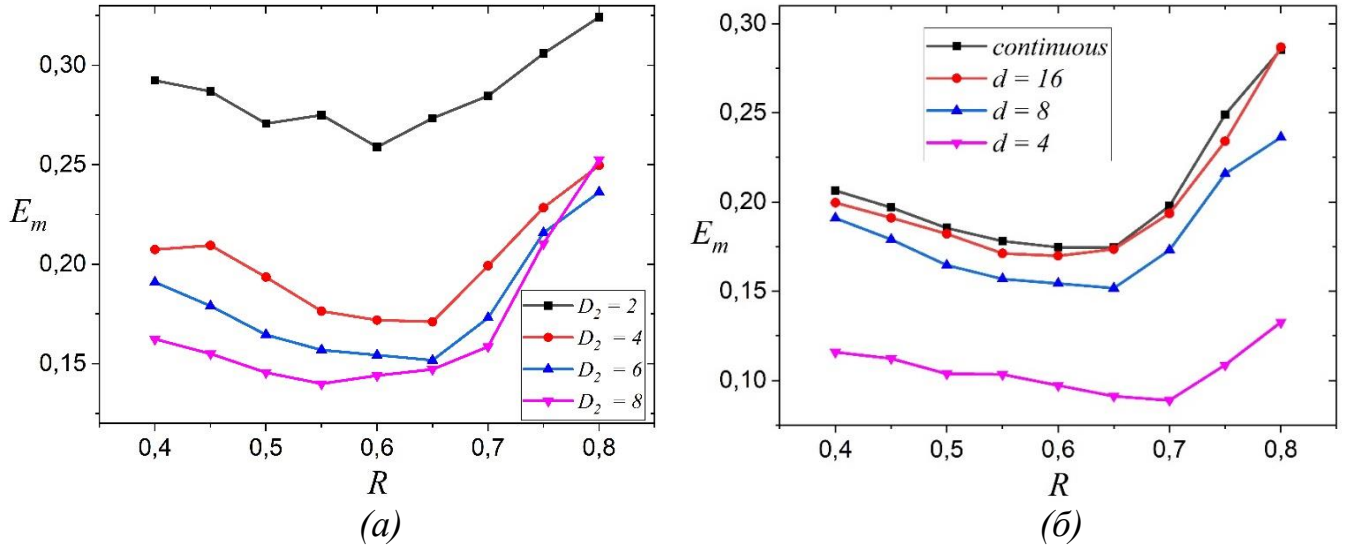


Рисунок 7 – График зависимости энергии перемагничивания  $E_m$  от отношения обменных интегралов  $R$ : а) для сплошной пленки и пленки с периодом решетки антиточек  $d = 8$  при различной толщине магнитомягкой составляющей  $D_2$ , б) для пленок с толщиной магнитомягкого слоя  $D_2 = 6 ML$  и различным периодом решетки антиточек.

**В четвертой главе** изучается влияние эффекта поверхностного магнетизма на фазовые переходы и перемагничивание тонких ферромагнитных пленок с решеткой антиточек. Рассматривается тонкая ферромагнитная пленка с порами квадратной формы и толщиной  $D$  моноатомных слоев (ML). Поры в пленке имеют размер  $a \times a$  атомов. Поры располагаются в узлах квадратной сетки с периодом  $d$ .

Для описания магнитных свойств ферромагнитных пленок с легкой осью намагничивания используется модель Изинга. Гамильтониан системы в относительных единицах имеет вид:

$$H = \frac{H_0}{J} = - \sum_{Bulk} S_{ij}S_{kl} - R \sum_{Surface} S_{ij}S_{kl} - \sqrt{R} \sum_{\frac{B}{S}} S_{ij}S_{kl} - h \sum S_{ij}. \quad (5)$$

Здесь  $R = J_S/J$ ,  $h = \mu_B h_0/J$ .  $J$  – обменный интеграл спинов внутри пленки,  $J_S$  – обменный интеграл на поверхности пленки,  $J_{BS} = \sqrt{J \cdot J_S}$  – обменный интеграл между спинами на поверхности пленки и первым подповерхностным слоем,  $h_0$  – напряженность внешнего магнитного поля,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Поры моделируются с помощью атомов с нулевым спином. Температура системы  $T$  также рассчитывается в относительных единицах  $T = k_B t/J$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана, а  $t$  – термодинамическая температура.

В компьютерном эксперименте моделировались пленки с линейными размерами  $L \times L \times D$ . Роль параметров порядка играют поверхностная намагниченность  $m_S$  и объемная намагниченность  $m$ .

$$m = \left( \sum_{i,j=1}^L S_{ij} \right) / N, \quad m_S = \left( \sum_{i,j=1}^L S_{ij} \right) / N_S. \quad (6)$$

$L$  – линейный размер системы,  $N$  – количество ненулевых спинов в объеме системы,  $N_S$  – количество ненулевых спинов на поверхности пленки с учетом поверхности внутри пор.

Для формирования спиновых конфигураций использовался алгоритм Метрополиса и теория конечномерного скейлинга. Для изучаемой системы определялась температура фазового перехода для основного объема системы  $T_C$  и точка Кюри для поверхности системы  $T_S$ . Температуры фазовых переходов независимо определялись по трем параметрам: кумулянтам Биндера четвертого порядка, магнитным восприимчивостям, энергетическим кумулянтам четвертого порядка и теплоемкостям системы. Необходимость определения точки Кюри по четырем параметрам обусловлена нестабильностью поведения системы при наличии поверхностного фазового перехода.

Компьютерное моделирование показывает, что для сплошных пленок толщиной не более  $6ML$  не наблюдается поверхностный фазовый переход. Вся система переходит из парамагнитного в ферромагнитное состояние при одной и той же температуре при всех отношениях обменных интегралов. Увеличение отношения обменных интегралов  $R$  приводит к росту температуры Кюри для пленок с порами различного размера (Рис. 8). Увеличение размера пор приводит к понижению температуры Кюри, так как добавление решетки антиточек увеличивает площадь свободной поверхности.

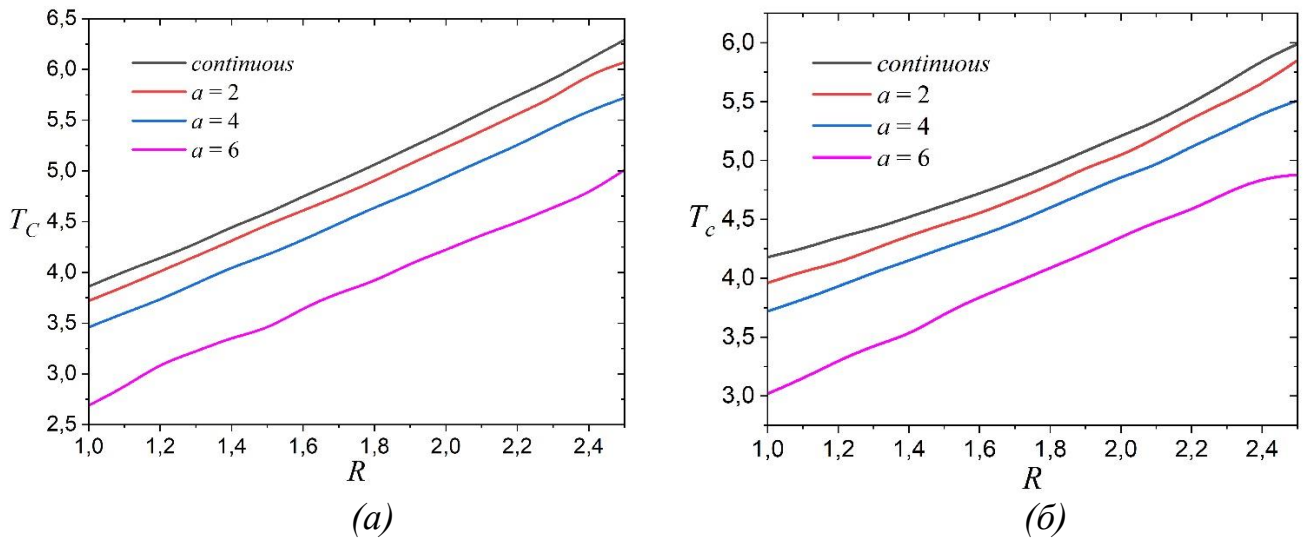


Рисунок 8 – Фазовые диаграммы для пленок толщиной  $D = 4 \text{ ML}$  (а) и  $D = 6 \text{ ML}$  (б) при различном значении размера пор.

Начиная с толщины  $D = 7 \text{ ML}$  на фазовых диаграммах пленок появляются три фазы: объемно неупорядоченная поверхностно неупорядоченная (*BDSO*), объемная упорядоченная поверхностно упорядоченная (*BOSO*), объемно неупорядоченная поверхностно упорядоченная фаза (*BOSD*). Эти три фазы разделены линиями фазовых переходов: *BDSO/BOSO* – обычный фазовый переход (ordinary), *BDSO/BDSO* – поверхностный фазовый переход (surface), *BDSO/BOSO* – экстраординарный фазовый переход (extraordinary). Три линии фазовых переходов пересекаются в трикритической точке, получившей название специального фазового перехода (special) (Рис. 9).

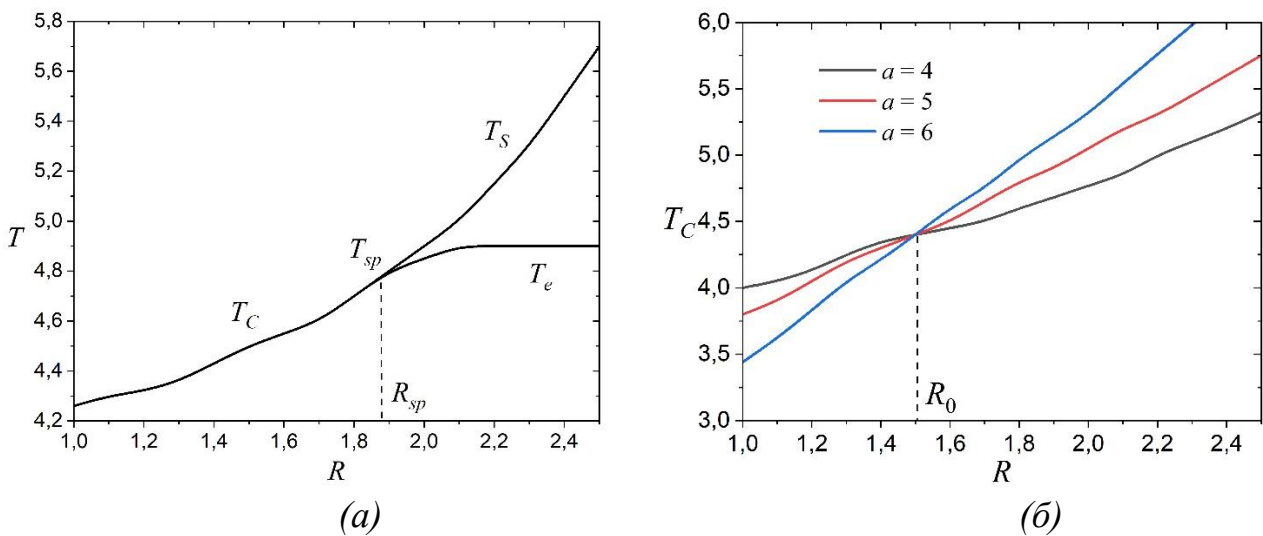


Рисунок 9 – Примеры фазовых диаграмм ферромагнитных пленок толщиной  $D = 12 \text{ ML}$ : а)  $a = 2$ , б)  $a = 4$ ,  $a = 5$ ,  $a = 6$ .

Решетка антиточек уменьшает область диаграммы, в которой наблюдается фаза *BDSO*, что приводит к снижению разницы между температурами специального и экстраординарного фазовых переходов. Также повышается значение отношения объемных интегралов  $R$ , при котором происходит специальный фазовый переход. Для пленок с порами больше порогового значения  $a_m$  реализуется только обычный фазовый переход, а фаза *BDSO* отсутствует. Существует отношение обменных интегралов  $R_0$ , при котором размер пор не влияет на температуру Кюри. Пороговое значение  $a_m$  определяется толщиной пленки (Рис. 10(а)) и имеет ступенчатый вид. Отношение обменных интегралов  $R_{sp}$ , соответствующего специальному фазовому переходу, также зависит от толщины пленки и размера пор (Рис. 10(б)).

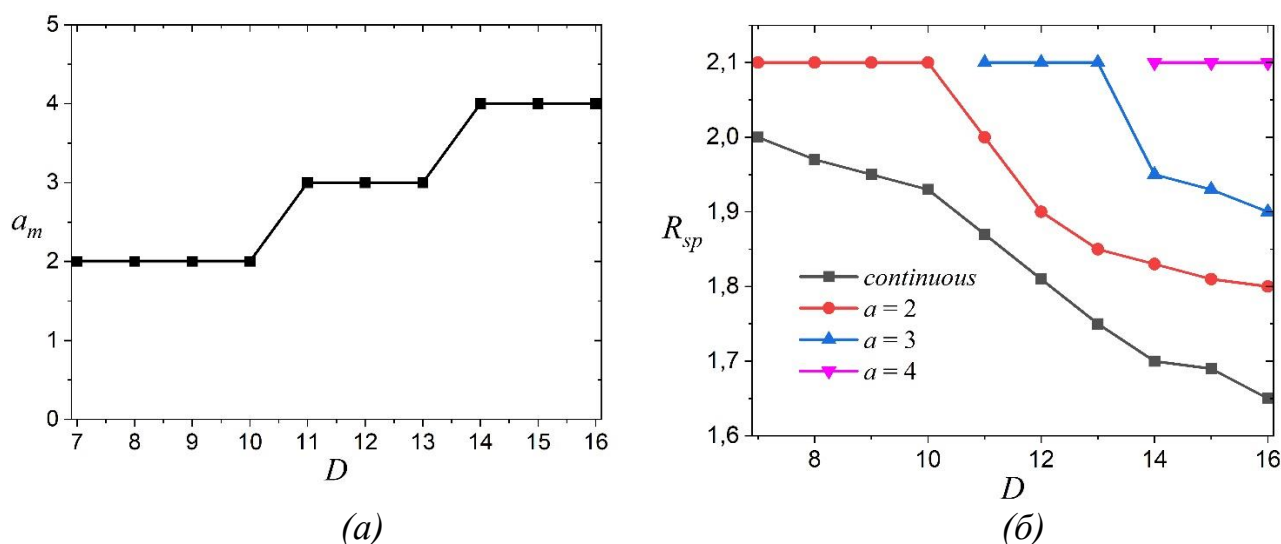


Рисунок 10 – а) График зависимости порогового значения  $a_m$  от толщины пленки  $D$ . б) Графики зависимости  $R_{sp}$  от толщины пленки  $D$  для различного размера пор  $a$ .

Для исследования процесса перемангничивания температура системы выбиралась так, чтобы система находилась ниже линии обычного и экстраординарного фазовых переходов, то есть в ферромагнитной фазе. Расчеты показали, что рост поверхностного обменного интеграла приводит к увеличению ширины петли гистерезиса и росту коэрцитивной силы  $H_C$ . При увеличении толщины пленки влияние поверхностного магнетизма снижается и размер петли гистерезиса изменяется меньше. Такая же закономерность наблюдается для пленок с решеткой антиточек. При равенстве обменных интегралов на поверхности и в объеме системы добавление решетки антиточек снижает коэрцитивность пленки. Однако с

увеличением поверхностного обменного интеграла коэрцитивная сила растет (Рис. 11(а)). Коэрцитивная сила зависит от размера пор. Причем скорость ее роста повышается с увеличением размера пор. Для пленок любой толщины существует критическое значение  $R_C$ , при котором пересекаются графики зависимости коэрцитивной силы от отношения обменных интегралов. При величине  $R = R_C$  коэрцитивная сила пленки не зависит от размера пор решетки антиточек. Значение  $R_C$  уменьшается при увеличении толщины пленки  $D$ . Аналогичная зависимость наблюдается для энергии перемагничивания (Рис. 11(б)).

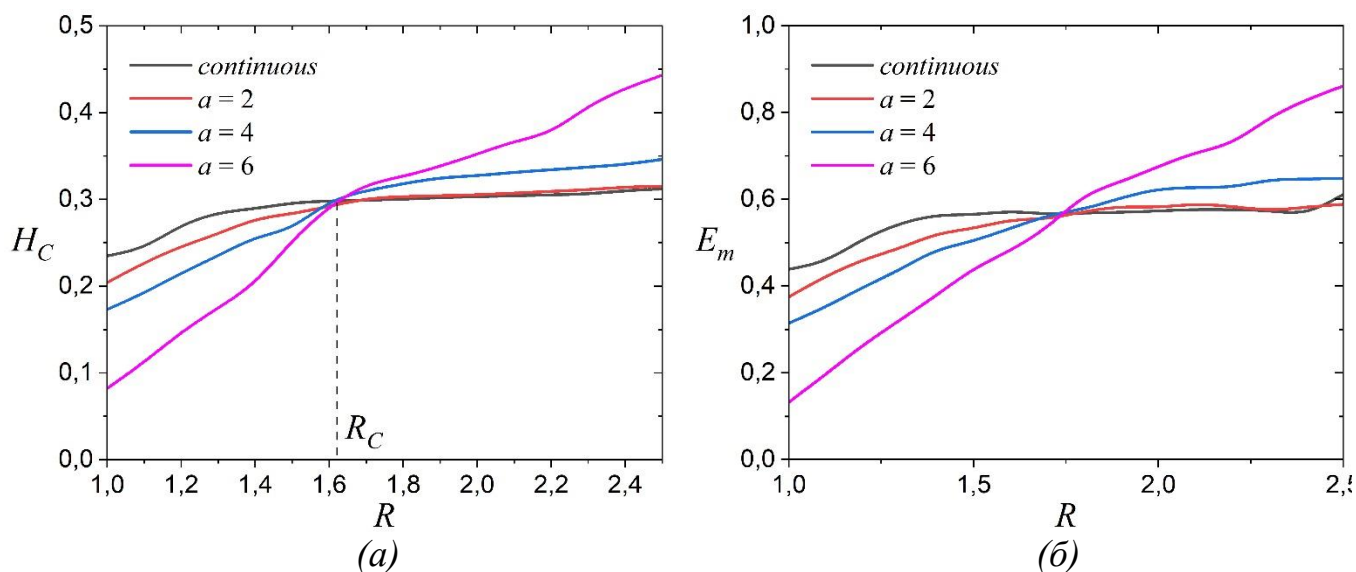


Рисунок 11 – Зависимости коэрцитивной силы  $H_C$  (а) и энергии перемагничивания  $E_m$  (б) от отношения обменных интегралов для пленок толщиной  $D = 16 ML$  и решеткой антиточек с порами размера  $a$ .

### Заключение

В заключении представлены основные результаты диссертационного исследования. Показано, что решётка наноразмерных пор в тонких ферромагнитных плёнках приводит к нелинейному увеличению температуры Кюри с ростом периода решётки, причём её значение стремится к температуре Кюри сплошной плёнки. Установлено, что определяющим фактором является площадь свободной поверхности, задающая среднее координатное число спинов. Зависимость критической температуры аппроксимируется логарифмическим законом при условии, что доля внутренней поверхности пор не превышает 0,25 от общей свободной поверхности. Критическое поведение изменяется ступенчато: при малых

размерах пор сохраняется класс универсальности сплошной плёнки, а при размерах пор, превышающих расстояния между ними, реализуется новый класс. Полученные закономерности устойчивы к вариациям формы пор и их положения.

Показано, что геометрические параметры решётки пор определяют коэрцитивную силу и энергию перемагничивания. Коэрцитивная сила нелинейно возрастает с увеличением периода решётки и толщины плёнки и достигает насыщения при толщине  $D = 12 ML$ , при этом её максимальное значение уменьшается с ростом размера пор. Это позволяет управлять магнитными полями переключения и энергозатратами в устройствах спинтроники.

Для бислойных плёнок установлено, что температура Кюри определяется магнитотвёрдым слоем и не зависит от толщины магнитомягкого слоя. Критическая температура возрастает с увеличением периода решётки пор. Показано, что при  $R < 0,5$  магнитомягкий слой существенно искажает петлю гистерезиса, тогда как уменьшение периода решётки снижает это искажение, а также коэрцитивную силу. Зависимости коэрцитивной силы и энергии перемагничивания от отношения обменных интегралов имеют минимум в интервале  $0,6 \leq R \leq 0,7$ , сохраняющийся при любых геометрических параметрах. Увеличение плотности пор дополнительно снижает коэрцитивную силу и энергозатраты.

Установлено, что поверхностный магнетизм оказывает более сильное влияние в наноструктурированных плёнках. В плёнках толщиной до 6 моноатомных слоёв реализуются только парамагнитная и ферромагнитная фазы, тогда как при толщине не менее 7 слоёв возможно поверхностное магнитное упорядочение при парамагнитном состоянии объёма. Такое состояние возникает при превышении критического отношения обменных интегралов, которое убывает с ростом толщины. Наличие решётки пор снижает разность температур фазового перехода и приводит к существованию критического размера пор, подавляющего поверхностный фазовый переход.

Показано, что поверхностный магнетизм влияет на коэрцитивную силу: при  $R > R_C$  она возрастает, при  $R < R_C$  уменьшается, а при  $R = R_C$  влияние решётки пор отсутствует. Критическое значение убывает с ростом толщины и стремится к  $R_C =$

1,55. Это необходимо учитывать при выборе геометрии пор и материалов с различной поверхностной энергией.

Расчёты выполнены в рамках модели Изинга, применимой для тонких плёнок с выраженной анизотропией. При увеличении толщины требуется переход к модели Гейзенберга с учётом анизотропии, что определяет дальнейшее развитие исследований.

### **Публикации автора по теме диссертации**

#### **Публикации в журналах из списка ВАК:**

1. Belim, S.V. Computer Simulation of Phase Transitions in Thin Films with an Antidote Lattice. / S.V Belim, S.S. Belim, I.V. Tikhomirov, I.V. Bychkov // Coatings. – 2022. – V. 12. – P. 1526. <https://doi.org/10.3390/coatings12101526>

2. Belim, S.V. Effect of disorder on phase transitions in antidote lattice thin films: computer simulations. / S.V. Belim, S.S. Simakova, I.V. Tikhomirov // Letters on Materials. – 2023. – V.13, Is. 4. – P. 304-307.

3. Белим, С.В. Магнитные свойства бислойной пленки с решеткой антиточек: монте-карло-моделирование / С.В. Белим, С.С. Симакова, И.В. Тихомиров // Физика металлов и металловедение. - 2024. - Т. 125. - №12. - С. 1512-1521.

4. Belim, S.V. Effect of surface magnetism on ferromagnetic films with an antidote lattice: Monte Carlo simulation. / S.V. Belim, S.S. Simakova // Letters on Materials. – 2025. – V. 15. – №. 4. – P. 230-235

5. Belim, S.V. Influence of surface magnetism on phase transitions in thin ferromagnetic films with antidot lattice: Monte Carlo simulation. / S.V. Belim, S.S. Simakova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2026. – V. 645. – P. 173951.

#### **Публикации в прочих изданиях:**

1. Компьютерное моделирование перемагничивания тонких пленок с решеткой антиточек. / С.С. Симакова, И.В. Тихомиров, С.В. Белим // Физика и технология перспективных материалов - 2023: сб. тр. Междунар. конф. (г. Уфа, 2–6 окт. 2023 г.)

2. Компьютерное моделирование фазовых переходов в тонких пленках с решеткой антидотов. / С.В. Белим, С.С. Симакова, И.В. Тихомиров // Сборник трудов

международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». (г. Махачкала, 10–15 сентября 2023 г.)

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

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

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

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

### **Цитируемая литература**

1. Golonzka, O. MRAM as embedded non-volatile memory solution for 22FFL FinFET technology / O. Golonzka, J. G. Alzate, U. Arslan, [et. al.] // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – IEEE, 2018. – P. 18.1. 1-18.1. 4.

2. Wolf, S. A. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future / S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman // Science – 2001. – Vol. 294. – P. 1488-1495

3. Калинин, Ю. Е. Магнитные и магниторезистивные свойства многослойных наноструктур (Co/CoO)<sub>60</sub> / Ю. Е. Калинин, К. С. Габриельс, В. А. Макагонов, и др. // Физика твердого тела. – 2025. – Т. 67. – №. 4. – С. 724-736.

4. Morales, R. Ultradense arrays of sub-100 nm Co/CoO nanodisks for spintronics applications / R. Morales, A.N. Flores, N.M. Vargas, [et. al.] // ACS Applied Nano Materials. – 2020. – Vol. 3. – №. 5. – P. 4037-4044.

5. Castán-Guerrero, C. Coercivity Dependence on Periodicity of Co and Py Antidot Arrays / C. Castán-Guerrero, J. Bartolomé, F. Bartolomé, [et. al.] // Journal of the Korean Physical Society – 2013 – Vol.62 – P. 1521-1524.

6. Deshpande, N.G. Tailoring of magnetic properties of patterned cobalt antidots by simple manipulation of lattice symmetry / N.G. Deshpande, M.S. Seo, X.R. Jin, [et. al.] // Applied Physics Letters. – 2010. – Vol. 96. №. 12. – P. 122503

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

8. Yuan, P. The magnetic and structural properties of BiFeO<sub>3-x</sub> (0 < x < 3) thin films with controllable oxygen vacancy / P. Yuan, D. Li, L. Wu, L. Shi // Ceramics International. – 2019. – Vol. 45. – №. 9. – P. 12594-12598.

9. He, S. Helium-ion-beam nanofabrication: extreme processes and applications / S. He, R. Tian, W. Wu, [et. al.] // International Journal of Extreme Manufacturing. – 2020. – Vol. 3. – №. 1. – P. 012001.

10. Choudhury, S. Controlled Evolution of Spin Waves in Unconventional Defective Honeycomb Antidot Lattices / S. Choudhury, S. Barman, Y. Otani, A. Barman // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – Vol. 489. – P. 165408.

11. Kaidatzis, A. Nanopatterned hard/soft bilayer magnetic antidot arrays with long-range periodicity / A. Kaidatzis, R. P. del Real, R. Alvaro, [et. al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2020. – Vol. 498. – P. 166142.

12. Камилов, И. К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев // Успехи физических наук. – 1999. – Т. 169. №. 7. – С. 773-795.

13. Binder, K. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization / K. Binder // Physical Review Letters. – 1981. – Vol. 47. – №. 9. – P. 693.