

Компьютерное моделирование фазовых переходов в антиферромагнитных пленках

С.В. Белим
sbelim@mail.ru

Е.В. Трушникова
TrushnikovaEV@omsu.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация

В статье выполнено компьютерное моделирование антиферромагнитной модели Изинга, имеющей геометрию тонкой пленки. Рассмотрены случаи различной толщины пленки. Проведено моделирование для систем с различными константами обменного взаимодействия на поверхности пленки. Получена зависимость температуры фазового перехода от толщины пленки и величины обменного взаимодействия. Показано, что в тонких пленках не наблюдается поверхностный фазовый переход.

Введение

Явление поверхностного магнетизма тесно связано с наличием поверхностной энергии в магнитных системах [1]. Поверхностная энергия намагничивания обусловлена отличием значений обменного интеграла в поверхностном слое спинов от аналогичного значения в основном объеме системы. В результате может наблюдаться сдвиг температуры фазового перехода в поверхностном слое по сравнению с объемным значением. В рамках феноменологического подхода в работах [2, 3] была построена фазовая диаграмма для полугораниченных систем с плоской свободной поверхностью. Если рассматривать свободную поверхность и основной объем системы как две взаимодействующие подсистемы, то возможна реализация трех фаз: полностью неупорядоченная фаза (SD/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза (SO/BD) и поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SO/BO). Между этими фазами может наблюдаться три вида фазовых переходов: из SD/BD в SO/BD – поверхностный фазовый переход, из SO/BD в SO/BO – экстраординарный фазовый переход, из SD/BD в SO/BO – обычный фазовый переход. Кривые этих трех переходов на фазовой диаграмме пересекаются в одной точке, в фазовый переход в которой получил название специального. Указанные виды фазовых переходов в рамках теоретико-полевого подхода были изучены в работах [4, 5, 6].

Фазовый переход на поверхности системы при температуре T_s , превышающей точку Кюри для данного вещества T_c были экспериментально обнаружены, например, для поликристаллического Gd [7] ($T_s - T_c = 15\text{ K}$). Также экспериментально наблюдались поверхностные фазовые переходы при температуре ниже точки обычного фазового перехода, например, для антиферромагнитного макроскопического кристалла Fe_3BO_6 $T_c - T_s = 8.5\text{ K}$, кристалла Fe_3BO_6 [8] $T_c - T_s = 5\text{ K}$. Отличие температуры поверхностного и обычного фазового перехода обусловлено различием значений обменных интегралов между поверхностными спинами и спинами в объеме системы. Наличие такой разницы было показано на основе расчетов из первых принципов в статьях [9, 10], и подтверждено экспериментально в работах [11, 12].

Copyright © by the paper's authors. Copying permitted for private and academic purposes.

In: Sergey V. Belim, Nadezda F. Bogachenko (eds.): Proceedings of the Workshop on Data, Modeling and Security 2018 (DMS-2018), Omsk, Russia, October 2018, published at <http://ceur-ws.org>

Например, из первых принципов было показано, что для FeO поверхностная энергия линейно зависит от химического потенциала [13]. Аналогичные расчеты из первых принципов для Gd [9] позволили вычислить расстояние между атомами в объеме кристалла 3.52Å и на поверхности 3.64Å. Отличие расстояний между атомами приводит к различию в значении обменных интегралов. Для основного объема система обменный интеграл $J_B = 1.51$, тогда как на поверхности системы $J_S = 1.25$, их отношение $R = J_S/J_B = 0.83$.

Из результатов компьютерного моделирования спиновых систем [14, 15, 16] следует, что поверхностный фазовый переход с температурой, превышающей температуру обычного перехода, наблюдается при условии $J_S/J_B > 1.55$. В точке $J_S/J_B = 1.55$ происходит специальный фазовый переход. Фазовая диаграмма на основе результатов компьютерного моделирования была построена в работах [17, 18]. В отличие от феноменологической модели на этой фазовой диаграмме присутствует дополнительная поверхностно-неупорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SD/BO), реализующаяся при $J_S/J_B < 1$. Соответственно на фазовой диаграмме присутствует дополнительная трикритическая точка пересечения линий фазовых переходов.

В описанных выше работах предполагалось, что обменный интеграл отличается от объемного только для спинов, расположенных на поверхности системы. Однако в реальных спиновых системах необходимо также учитывать отличие от объемного значения и для обменного интеграла взаимодействия поверхностного слоя с первым подповерхностным. В работе [19, 20, 21] было показано, что такой учет изменяет фазовую диаграмму – вместо двух трикритических точек присутствует одна тетракритическая, в которой пересекаются четыре линии фазовых переходов. Учет энергии взаимодействия поверхностного слоя с первым подповерхностным может существенно сказаться при моделировании фазовых переходов в тонких пленках, так как общее количество слоев мало.

Целью данной статьи является компьютерное моделирование фазовых переходов в тонких антиферромагнитных изинговских пленках.

1 Описание системы

Гамильтониан модели Изинга для антиферромагнитных систем, имеющих геометрию тонкой пленки имеет вид:

$$H = -J_B \sum_B S_i S_j - J_S \sum_S S_i S_j - J_{BS} \sum_S S_i S_j.$$

S_i – значения спина в i -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$). Во всех трех слагаемых суммирование осуществляется только по парам ближайших соседей. При этом в первом слагаемом учитываются пары, в которых оба спина расположены не на поверхности. Во втором слагаемом рассматриваются пары спинов, расположенных на поверхности. В третьем слагаемом один из спинов расположен на поверхности, а второй непосредственно под ним в объеме системы. J_B – обменный интеграл в объеме системы, J_S – обменный интеграл на поверхности системы, J_{BS} – обменный интеграл взаимодействия поверхности с первым подповерхностным слоем. Для отношения обменных интегралов введем обозначение:

$$R_S = J_S/J_B, \quad R_{BS} = J_{BS}/J_B.$$

Будем рассматривать систему с простой кубической решеткой, имеющей линейные размеры $L \times L \times D$, где D – толщина пленки. Пленка ограничена двумя свободными поверхностями $z = 0$ и $z = D - 1$. Вдоль осей Ox и Oy накладывались периодические граничные условия.

Моделирование поведения системы вблизи линии фазовых переходов осуществлялось методом Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса. Для определения термодинамических параметров системы использовалась теория конечномерного скейлинга [15].

Для моделирования фазовых переходов, происходящих в системе, необходимо ввести параметр порядка. Так как система антиферромагнитная, то в качестве параметра порядка m будет выступать шахматная намагниченность спинов. Учитывая, что мы рассматриваем две взаимодействующие подсистемы, то, кроме объемного параметра порядка m , необходимо ввести поверхностный параметр порядка m_S , определяемый как шахматная намагниченность спинов, расположенных на свободной поверхности $z = 0$. Для второй свободной поверхности параметр порядка не вводился и не рассматривался в силу симметрии системы.

Для определения температуры фазового перехода будем вычислять куммулянты Биндера четвертого порядка [14] для флуктуаций объемного U и поверхностного U_S параметров порядка:

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

Угловыми скобками обозначено термодинамическое усреднение.

Куммулянты Биндера вычислялись для систем с различным линейным размером L . После чего строились графики зависимости $U(T)$ и $U_S(T)$. Температура объемного фазового перехода T_N вычислялась как точка пересечения кривых $U(T)$ для различных линейных размеров системы L . Температура поверхностного фазового перехода T_S определялась как точка пересечения кривых куммулянтов $U_S(T)$.

2 Результаты компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование осуществлялось для антиферромагнитных пленок толщиной от $D = 4$ слоев до $D = 12$ слоев. Линейные размеры системы изменялись от $L = 16$ до $L = 48$ с шагом $\Delta L = 4$. Параметр отношения поверхностного обменного интеграла к объемному изменялось в интервале от $R_S = 0.5$ до $R_S = 2.0$ с шагом 0.1. Для второго отношения обменных интегралов брались предельные значения $R_{BS} = 1$ и $R_{BS} = R_S$. Для всех значений параметров определялась температура объемного фазового перехода T_N и температура поверхностного фазового перехода T_S .

Результаты моделирования представлены на рисунках 1 и 2. На первом рисунке показан график зависимости температуры объемного фазового перехода T_N от отношения обменных интегралов R_S при $R_{BS} = 1$ и различной толщине пленок. На рисунке 2 представлена та же зависимость при $R_{BS} = R_S$.

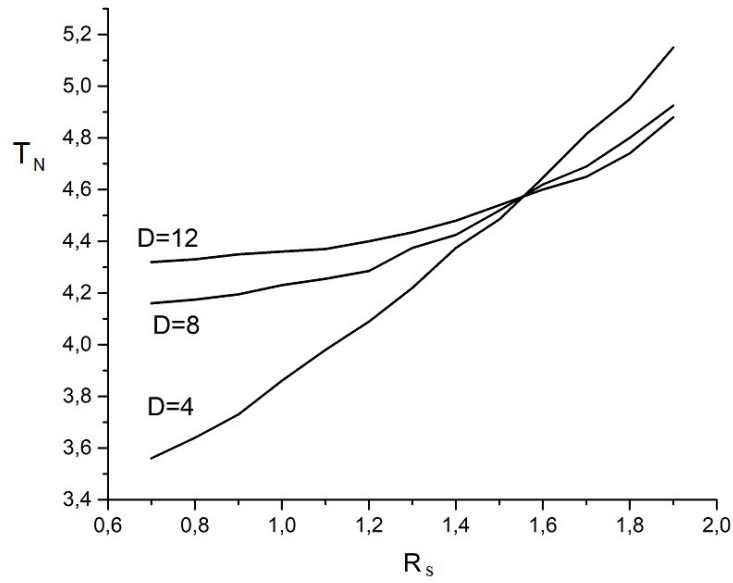


Рис. 1: Зависимость температуры объемного фазового перехода T_N от отношения обменных интегралов R_S при $R_{BS} = 1$ для пленок различной толщины D .

Проводя анализ результатов компьютерного моделирования прежде всего необходимо отметить совпадение температуры объемного и поверхностного фазовых переходов при всех значениях отношений обменных интегралов R_S , R_{BS} и всех исследовавшихся толщин пленок D . Также следует отметить, что температура перехода растет с увеличением R_S , что отличает тонкие пленки от полностью бесконечных систем и полуограниченных систем, для которых температура постоянна. Рост температуры фазового перехода объясняется тем, что поверхностная энергия дает существенный вклад в общую энергию систему в силу малого количества слоев. Аналогичные результаты были получены при компьютерном моделировании ферромагнитных систем [22]. Сравнение графиков, представленных на рисунках 1 и 2, показывает, что рост энергии взаимодействия поверхностного слоя с первым подповерхностным слоем приводит к увеличению скорости роста температуры перехода. Данная зависимость также объясняется более сильным влиянием поверхностного слоя на систему в целом.

Заключение

Из результатов компьютерного моделирования можно сделать вывод, что поведение антиферромагнитных пленок вблизи линий фазовых переходов существенно отличается от бесконечных и полубесконечных

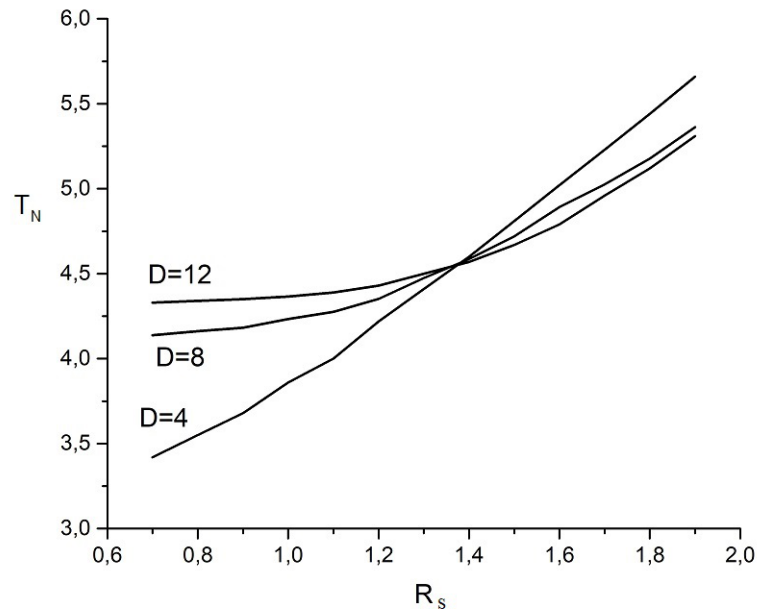


Рис. 2: Зависимость температуры объемного фазового перехода T_N от отношения обменных интегралов R_S при $R_{BS} = R_S$ для пленок различной толщины D .

систем. Главное отличие состоит в росте температуры объемного фазового перехода и отсутствии поверхностного фазового перехода. Скорость роста температуры зависит от толщины пленки и величины взаимодействия поверхностных спинов с первым подповерхностным слоем.

Список литературы

- [1] M.I. Kaganov. Surface Magnetism. *JETP*, 35(3):631–633, 1972.
- [2] K. Binder. Magnetic surface phenomena. *Phase transition and critical phenomena. Ed. by Domb C. And Lebowitz J.L. NY Academ. Press*, 3:325–331, 1983.
- [3] H.W. Diehl. The Theory of Boundary Critical Phenomena. *J. Mod. Phys. B.*, 11:3503–3523, 1997.
- [4] H.W. Diehl, M. Shpot. Massive field-theory approach to surface critical behavior in three-dimensional systems. *Nucl.Phys. B*, 528:595–647, 1998.
- [5] S.V. Belim. Critical behavior of disordered systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 103:611–623, 2006.
- [6] S.V. Belim. Multicritical behavior of systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 106: 773–780, 2008.
- [7] C. Rau, M. Robert. Surface magnetization of Gd at the bulk Curie temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2714–2717, 1987.
- [8] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev. Mossbauer Study Of Spin-Flip Phase-Transition On The Fe_3BO_6 Surface. *JETP LETTERS*, 57(9):557–561, 1993.
- [9] C.-Yu. Lin, J.-L. Li, Y.-H. Hsieh, K.-L. Ou, B.A. Jones. Magnetic interaction between surface-engineered rare-earth atomic spins. *Phys. Rev. X*, 2:021012, 2012.
- [10] P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa, V.S. Stepanyuk. Tuning Magnetic Anisotropy in Metallic Multilayers by Surface Charging: An Ab Initio Study. *Phys. Rev. Lett.*, 110:267203, 2013.
- [11] P. Ruiz-Diaz, V.S. Stepanyuk. Effects of surface charge doping on magnetic anisotropy in capping 3d-5d(4d) multilayers deposited on highly polarizable substrates. *J. Phys. D. Appl.Phys.*, 47:105006, 2014.

- [12] O.O. Brovko, P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa, V.S. Stepanyuk. Controlling magnetism on metal surfaces with non-magnetic means: electric fields and surface charging. *J. Phys. Condens. Matter.*, 26:093001, 2014.
- [13] I. Bernal-Villamil, S. Gallego. Structure and magnetism of the $(2 \times 2) - FeO(111)$ surface. *Phys. Rev. B*, 94:075431, 2016.
- [14] D.P. Landau, K. Binder. Phase Diagrams and Multicritical Behavior of a Three-Dimensional Anisotropic Heisenberg Antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 17:2328–2342, 1978.
- [15] C. Ruge, F. Wagner. Critical parameters for the $d = 3$ Ising model in a film geometry. *Phys. Rev. B*, 52:4209–4216, 1995.
- [16] M. Vendruscolo, M. Rovere, A. Fasolino. Magnetic-phase transitions of Ising surfaces with modified surface-bulk coupling: A Monte Carlo study. *Europhys. Lett.*, 20:547–552, 1992.
- [17] S.V. Belim, T.A. Koval'. Monte Carlo study of the magnetization distribution in semi-infinite systems upon phase transitions. *Phys. Metals Metallogr.*, 115(9):843–848, 2014.
- [18] S.V. Belim, T.A. Koval'. Computer simulation of surface phase transitions in semi-infinite Ising magnets. *J. of Surface Investigation*, 9(6):1130–1136, 2015.
- [19] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Computer Modeling of Phase Transitions of Semibounded Antiferromagnets. *Journal of Physics: Conf. Series*, 944:012011(1–7), 2017.
- [20] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Computer Simulation of Critical Behavior of Semi-Infinite Antiferromagnetic Material. *Physics of Metals and Metallography*, 119(5):441–447, 2018.
- [21] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Research into the Surface Phase Transition of Semibounded Antiferromagnetic Systems via Computer Simulation. *J. of Surface Investigation*, 12(5):923–926, 2018.
- [22] M. Hamedoun, K. Bouslykhane, H. Bakrim, A. Hourmatallah, N. Benzakour, R. Masrour. Phase diagrams of site diluted ferromagnetic thin film. *J. Magn. Magn. Mater.*, 301:22–30, 2006.

Computer Simulation of Phase Transitions in Antiferromagnetic Films

Sergey V. Belim, Elizaveta V. Trushnikova

In article the computer modeling of antiferromagnetic Ising model is executed. The system has the thin film form. Cases of various thickness of a film are considered. Modeling for systems with various constants of an exchange interaction on a film surface is carried out. The dependence of transition temperature on a film's thickness and value of exchange interactions is received. In thin films the surface phase transition is not observed.