



«Идеи и методы физики конденсированного состояния»
XIV Всероссийская Школа-конференция молодых ученых
«Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», Сочи 2015

Моделирование критических свойств тонких магнитных пленок

Павел Прудников

кафедра теоретической физики,
Омский государственный университет



- 1 **Размерные эффекты в равновесном критическом поведении тонких магнитных пленок;**

Письма в ЖЭТФ **100**, 501 (2014);

J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015).

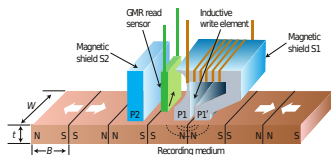
- 2 **Описание неравновесных эффектов в критической релаксации тонких пленок из начального состояния;**

J. Phys. Conf. Ser. **510**, 012018 (2014).

Авторский коллектив:

Владимир Васильевич Прудников,
Наталья Пискунова, Мария Медведева,
Алексей Елин, Анна Солдусова

Лаборатория прикладной теоретической физики и параллельных вычислений;



- устройства магнитной записи [1, 2, 3];
- устройства спинтроники [4].

Схема магниторезистивной записывающей головки жесткого диска, представленная IBM в 1991.

¹Developments in data storage : materials perspective / [edited by] S.N. Piramanayagam, Tow C. Chong, IEEE Press, Wiley:New Jersey, 2012 – 331p.;

²Fullerton, Margulies, et al., IEEE Trans. Magn., 2003;

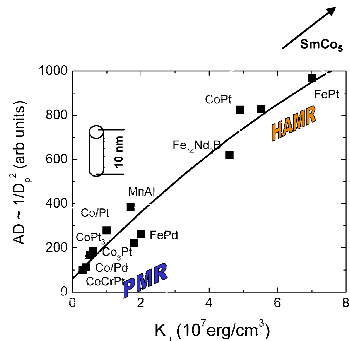
³Chappert, Fert, et. al, Nature Mater., 2007

⁴Mangin, Ravelosona, et al. Nature Mater., 2006.

- Heat assisted magnetic recording (HAMR) одна из технологий, позволяющих достичь плотности магнитной записи в 1 TBit/in² [5, 6];

- Требования к покрытию [7]:

- очень высокая одноосная магнитокристаллическая анизотропия;
- не столь высокие температуры Кюри (можно изменить допированием)
- сильная температурная зависимость переключающего поля.



⁵Rottmayer, Batra, et al., IEEE Trans. Magn., 2006;

⁶Seigler, Challener, et al., IEEE Trans. Magn., 2008;

⁷Kryder, Gage, et al., IEEE Proc., 2008;

System	d	n	β	γ	ν	Method	Ref.
2D Ising	2	1	0.125	1.75	1	Exact	[8]
2D XY system	2	2	0.231	-	-	RG	[9]
2D Heisenberg	2	3	-	-	-	Theory	[10]
3D Ising	3	1	0.325	1.241	0.630	RG	[11]
3D XY system	3	2	0.345	1.316	0.669	RG	[11]
3D Heisenberg	3	3	0.365	1.386	0.705	RG	[11]

⁸Onsager, Phys. Rev., 1944;

⁹Bramwell and Holdsworth, J. Appl. Phys.; J. Phys. Cond. Mat., 1993;

¹⁰Mermim and Wagner, Phys. Rev. Lett., 1966;

¹¹Guillou and Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett., 1977; Phys. Rev. B., 1980.

гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга [12]:

$$H = -J \sum_{i,j} \left\{ [1 - \Delta(N)] (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right\}, \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$;

J – константа обменного взаимодействия;

$\Delta(N)$ – константа анизотропии подложки:

$\Delta = 0$ соответствует изотропной модели Гейзенберга,

$\Delta = 1$ – модель Изинга;

N – число слоев в тонкой пленке [1..32]ML;

$L \times L$ – число спинов в каждом слое.

¹²К. Binder and D.P. Landau, Phys. Rev. B, 1976.

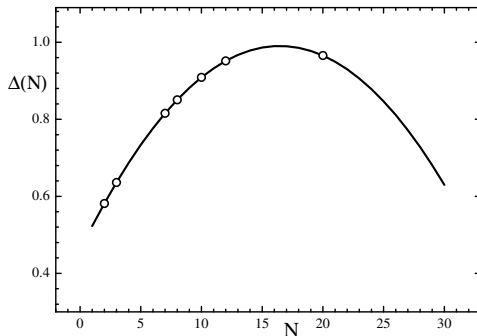


Рис. 1. Зависимость параметра анизотропии $\Delta(N)$ от толщины пленки N . Кружки на рисунке соответствуют эксперименту для Ni(111)/W(110) [13]

¹³Li and Baberschke, Phys. Rev. Lett., 1992;

С использованием модифицированного кластерного алгоритма Свендсена-Ванга [14,15] были исследованы температурные зависимости намагниченности m , ее составляющих: намагниченность ориентированная по нормали к плоскости m_z , намагниченность в плоскости пленки m_{\parallel} ,

$$m = \left\langle \frac{1}{N_s} \left[\left(\sum_i^{N_s} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^y \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^z \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle, \quad (2)$$

$$m_z = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} S_i^z \right\rangle, \quad m_{\parallel} = \left\langle \frac{1}{N_s} \left[\left(\sum_i^{N_s} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^y \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle,$$

и ориентационного параметра порядка [16, 17]

$$O_{\alpha} = \left\langle \frac{|n_h^{\alpha} - n_v^{\alpha}|}{n_h^{\alpha} + n_v^{\alpha}} \right\rangle, \quad (3)$$

где $n_h^{\alpha} = \sum_i \{1 - \text{sgn} [S^{\alpha}(r_x, r_y), S^{\alpha}(r_x + 1, r_y)]\}$,

$n_v^{\alpha} = \sum_i \{1 - \text{sgn} [S^{\alpha}(r_x, r_y), S^{\alpha}(r_x, r_y + 1)]\}$,

$\langle \dots \rangle$ – статистическое усреднение, $N_s = L \times L \times N$.

¹⁴R.H. Swendsen, J.S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 86.

¹⁵U. Wolff, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361.

¹⁶Booth, Maclsaac, Whitehead and De'Bell, Phys. Rev. Lett., 1995;

¹⁷Ambrose and Stamps, Phys. Rev. B, 2013.

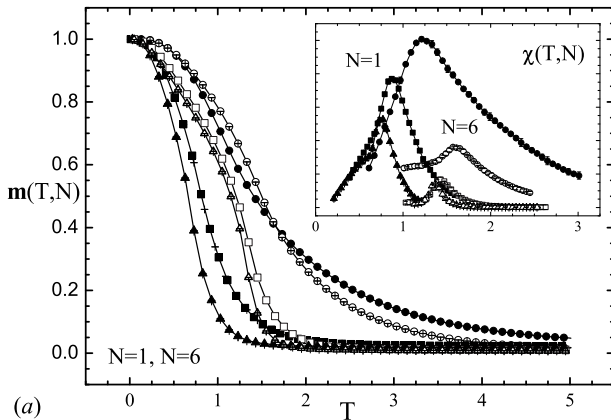


Рис. 2. Температурные зависимости намагниченности $m(T, N)$ и восприимчивости $\chi(T, N)$ (на вкладке) для различных размеров L :
 $N = 1$ – сплошные символы; $N = 6$ – открытые символы

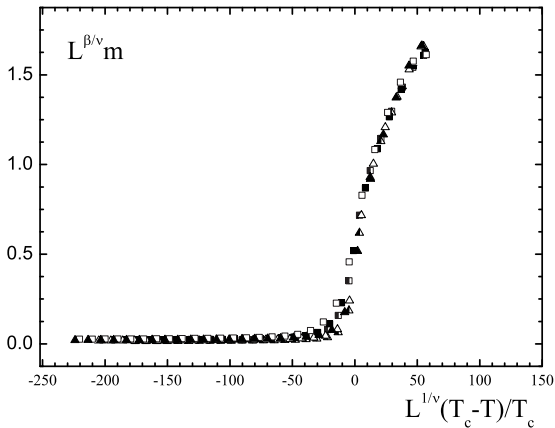


Рис. 3. Скейлинговая зависимость $f(m) = L^{\beta/\nu} m$ от $L^{1/\nu} (T_c - T) / T_c$

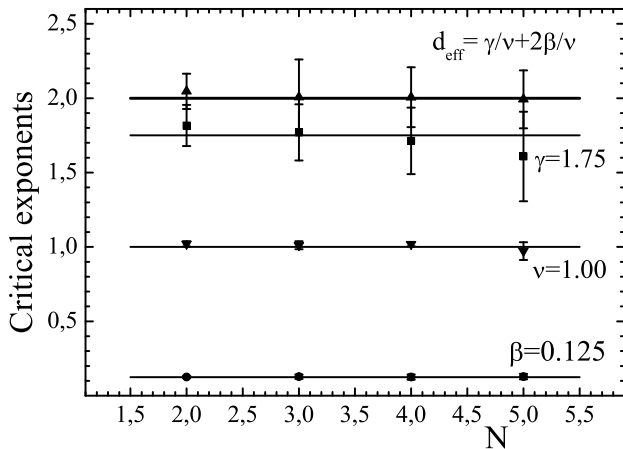


Рис. 4. Критические индексы для класса универсальности 2D модели Изинга

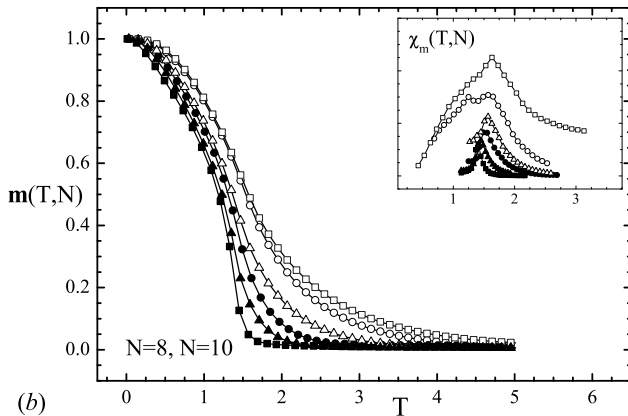


Рис. 5. Температурные зависимости намагниченности $m(T, N)$ и восприимчивости $\chi(T, N)$ (на вкладке) для различных размеров L :
 $N = 8$ – сплошные символы; $N = 10$ – открытые символы

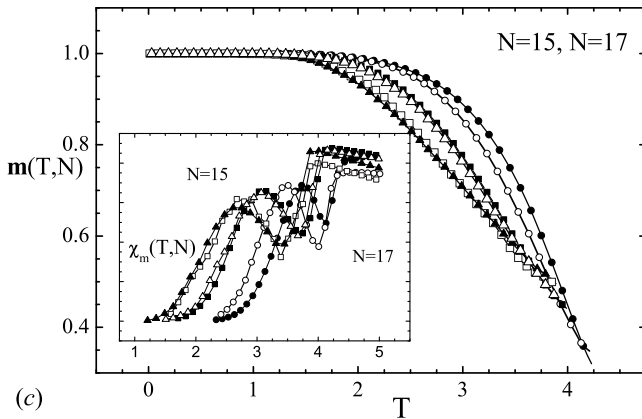


Рис. 6. Температурные зависимости намагниченности $m(T, N)$ и восприимчивости $\chi(T, N)$ (на вкладке) для различных размеров L :
 $N = 15$ – сплошные символы; $N = 17$ – открытые символы

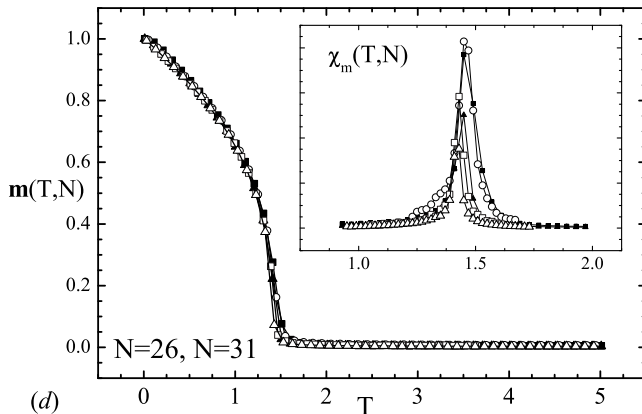


Рис. 7. Температурные зависимости намагниченности $m(T, N)$ и восприимчивости $\chi(T, N)$ (на вкладке) для различных размеров L :
 $N = 26$ – сплошные символы; $N = 31$ – открытые символы

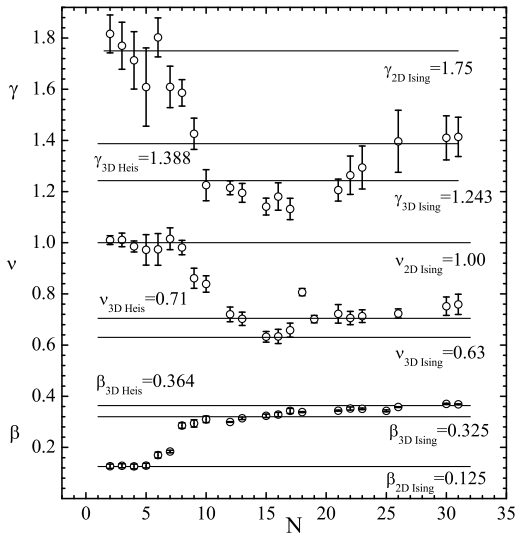


Рис. 8. Размерный переход в значениях индексов $\gamma(N)$, $\nu(N)$ и $\beta(N)$

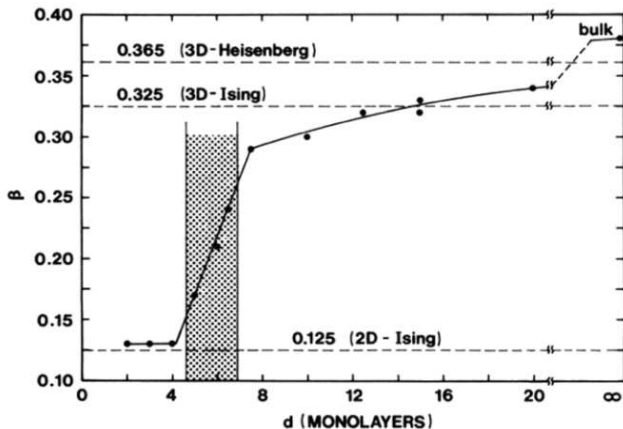


Рис. 9. Изменения критических индексов для пленок Ni(111)/W(110), демонстрирующие размерный переход от 2D к 3D [13, 18]

¹³Li and Baberschke, Phys. Rev. Lett., 1992;

¹⁸Vaz, Bland, Lauhoff, Rep. Prog. Phys., 2008.

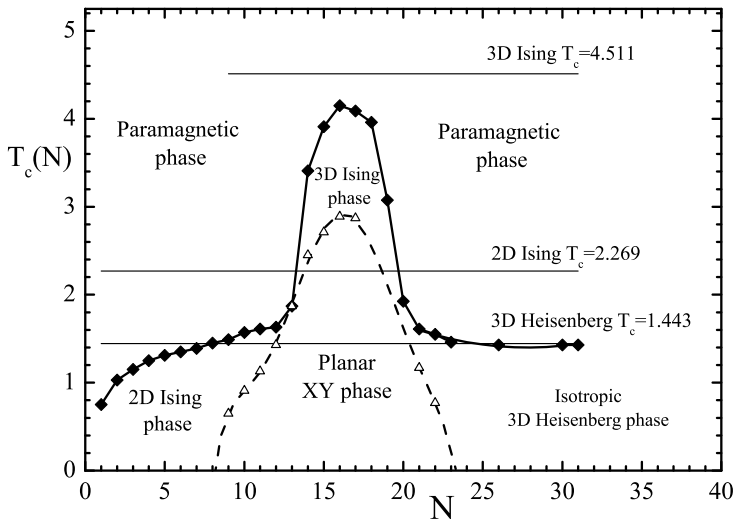


Рис. 10. Фазовая диаграмма для тонких пленок. Сплошная линия – переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную, штриховая линия – спин-ориентационный переход.

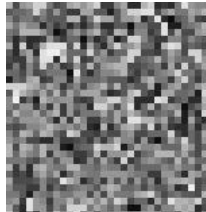
Полосовые структуры в анизотропных пленках [19]



Ferromagnetic Phase



Striped Phase
[present report]



Paramagnetic Phase

¹⁹Carubelli, Billoni, et al., Phys. Rev. B, 2008.

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i S_{i,z}^2 - h \sum_i \vec{S}_i + D \sum_{i \neq j} \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) \quad (4)$$

монослойная пленка с $D = 0$ демонстрирует поведение 2D анизотропной модели Гейзенберга

при $A = 0$ – переход отсутствует;

при $A > 0$ – изингоподобный переход порядок-беспорядок.

Примеры:

BaCo₂(AsO₄), CoCl₂ – GIC, [20]

Rb₂CrCl₄, Fe/Ag(100), Ni/Cu(100), [21].

²⁰Diaz-Mendez R., Mulet R. JMMM. 2012. V. 324. P. 128-134;

²¹Guo W., Shi L.P., Lin D.L. Phys. Rev. B. 2000. V. 62 P. 14259.

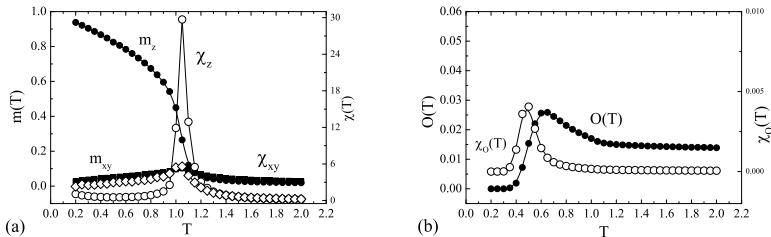


Рис. 11. Температурные зависимости (а) намагниченности m_z , m_{xy} , восприимчивости χ_m , χ_{xy} ; и (б) ориентационный параметр порядка O , χ_O для пленок с $A = 0.10J$, $D = 0.01J$

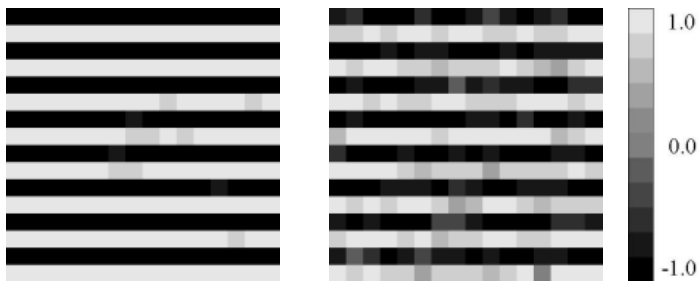


Рис. 12. Полосовая спиновая структура пленок с $N = 2$, $A = 0.10J$, $D = 10J$ при (a) $T = 0.7$ и (b) $T = 4.3$. Глубина цвета пропорциональна значению проекции S_y (черный: -1.0 , белый: $+1.0$).

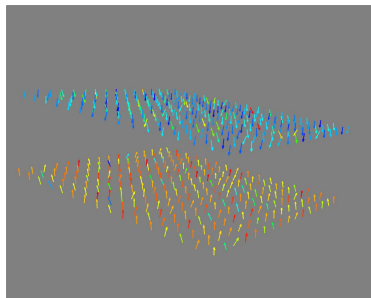
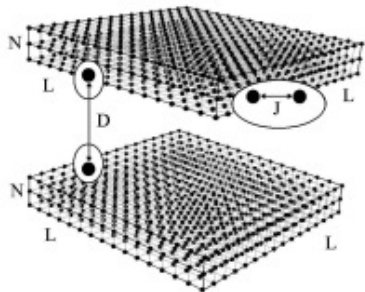


Рис. 13. Двухслойная структура с диполь-дипольным взаимодействием

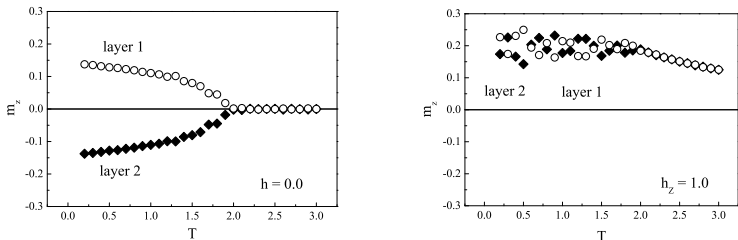


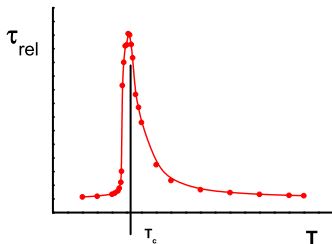
Рис. 14. Температурные зависимости перпендикулярной плоскости проекции намагниченности $m_z(T)$ в случае (a) $h = 0.0$ и (b) $h = 1.0$ для пленок с $A = 0.10J$, $D = 0.01J$

Критическое замедление

$$T_0 \Rightarrow T_s, \quad t \gg \tau_{\text{rel}} - \text{состояние равновесия};$$
$$\Rightarrow T_s = T_c(\tau = 0), \quad \tau_{\text{rel}}(\tau) \sim |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty, \text{ при } \tau = (T - T_c)/T_c \rightarrow 0.$$

Параметр порядка

$$m(t) = \langle S(r, t) \rangle \sim \frac{e^{-\frac{t}{\tau_{\text{rel}}(\tau)}}}{t^{\beta/\nu z}}.$$



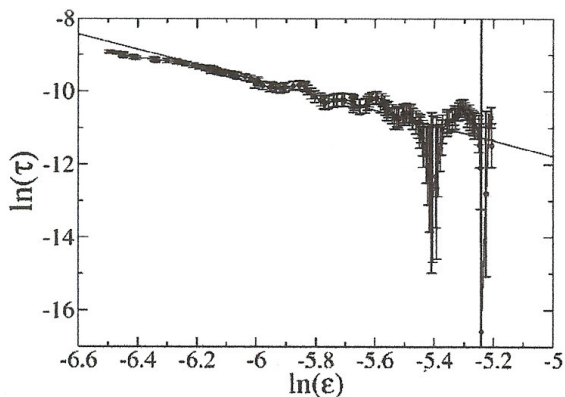
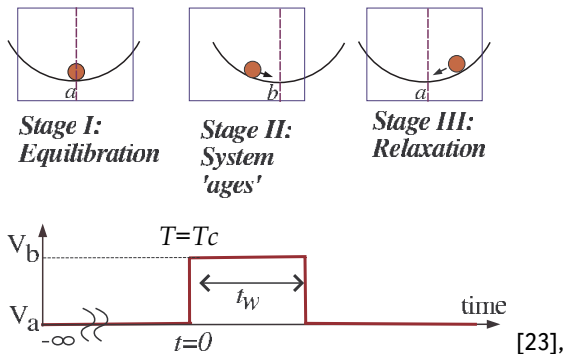


Рис. 15. Equilibration time of 2 monolayers Fe on W for $T_c = 453\text{K}$. Value $z\nu = 2.09 \pm 0.06$ corresponds 2D Ising ferromagnet [22]

²²M.J.Dunlavy, D.Venus, Phys. Rev. B **71**, 144406 (2005);



t_w – время ожидания («возраст системы»),
 $t - t_w$ – время наблюдения.

²³A. Amir, Y. Oreg, Y. Imry, Phys. Rev. Lett., 2009, arXiv:0902.1501;

- Автокорреляционная функция:

$$C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) S(0, t_w) \rangle - \langle S(x, t) \rangle \langle S(0, t_w) \rangle], \quad (5)$$

- Функция отклика:

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0}. \quad (6)$$

- $t - t_w < t_w$: $C = C(t - t_w)$ квазиравновесный режим;
- $t - t_w \sim t_w$: $C \approx t_w^{-2\beta/\nu z} F_C(t/t_w)$ режим старения;
- $t - t_w \gg t_w$: $C \sim (t/t_w)^\theta$ коротковременной режим [24],

$$1 \ll t_w < t \ll \tau_{\text{rel}} \sim |\tau|^{-z\nu}$$

²⁴Prudnikov, et al. Phys. Rev. E 81, 011130 (2010).

эффекты аномального критического замедления неравновесной критической релаксации при увеличении возраста системы

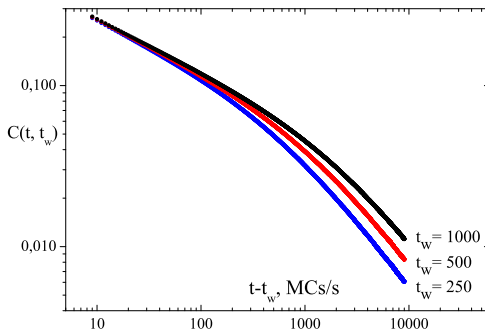


Рис. 16. Автокорреляционная функция $C(t, t_w)$ неупорядоченной 3D модели Изинга

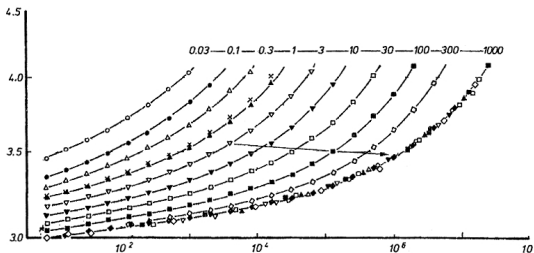


Рис. 17. Creep curves of rigid PVC quenched from 90 C to 20 C. After the ageing time t_e has passed (with values $t_e = [0.03, 0.1, 0.3, 1, 3, 10, 30, 100, 300, 1000]$ days from left to right), a small constant stress was applied and the compliance $J(t)$ was measured as a function of time t , in the range from 10^0 to 10^8 seconds [27,28]

²⁷L.C.E. Struik. Physical ageing in amorphous polymers and other materials. Elsevier, Amsterdam, 1978;

²⁸ M. Henkel, M. Pleimling, Ageing and dynamical scaling far from equilibrium, in Non-equilibrium Phase Transitions. – Heidelberg:Springer. 2010.

- Скейлинговая форма для временной зависимости k -го момента намагниченности [28]:

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-\frac{k\beta}{\nu}} m^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0) \quad (7)$$

- Высокотемпературное начальное состояние $m_0 \ll 1$: полагая $b = t^{1/z}$, намагниченность представляется в виде

$$m(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^{\theta'} (1 + At^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2, m_0^2)), \quad (8)$$
$$\theta' = (x_0 - \beta/\nu)/z$$

- При $\tau = 0$

$$m(t) \sim m_0 t^{\theta'} \quad (9)$$

Этап роста намагниченности: $t \lesssim t_m \sim m_0^{-1/(\theta' + \beta/\nu z)}$

²⁸Н.К. Janssen, В. Schaub, В. Schmittmann, Z. Phys. B 73, 539 (1989).

Эволюция из начального высокотемпературного состояния ($m_0 \ll 1$):

$$m(t) \sim t^{\theta'}$$

→

$$\theta' = 0.182(26) \quad (N = 2);$$

$$\theta' = 0.194(30) \quad (N = 4).$$

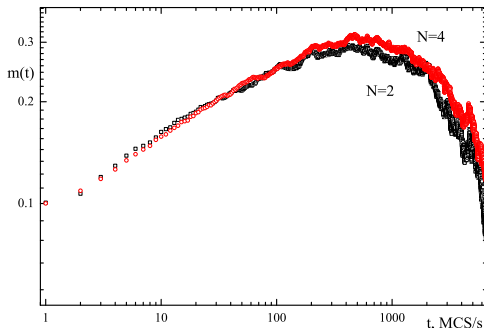


Рис. 18. Временные зависимости намагниченности $m(t)$ для $N = 2$: $T_c^{N=2} = 3.2076$ [30], и $N = 4$: $T_c^{N=4} = 3.8701$ [30]

³⁰Laosiritaworn, Poulter, and Staunton, Phys. Rev. B, 2004.

Релаксация из начального низкотемпературного состояния ($m_0 = 1$):

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z};$$

$$U_2(t) = [\langle m^2 \rangle / \langle m \rangle^2 - 1] \sim t^{d/z}; \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} z = 2.104(44) \quad (N = 2); \\ z = 2.193(51) \quad (N = 4). \end{array}$$

$$F_2(t) = \left[\langle m^2 \rangle \Big|_{m_0=0} \right] / \left[\langle m \rangle \Big|_{m_0=1}^2 \right] \sim t^{d/z}$$

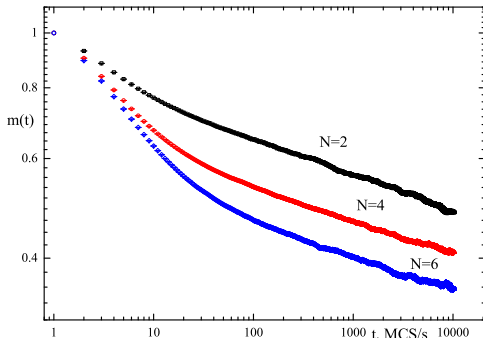


Рис. 19. Временные зависимости намагниченности $m(t)$ для $N = 2, 4$ и 6

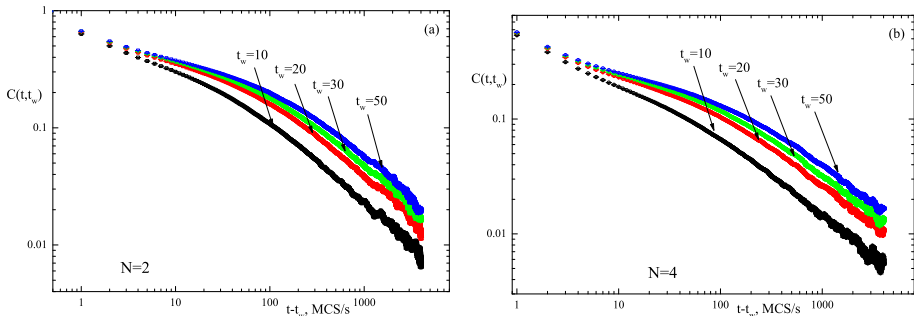


Рис. 20. Временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для $N = 2$ (а) и $N = 4$ (б) для различных t_w ($m_0 \ll 1$)

$$C(t, t_w) \sim \frac{e^{-\frac{(t-t_w)}{\tau_{rel}}}}{(t-t_w)^{c_a}}, \quad (10)$$

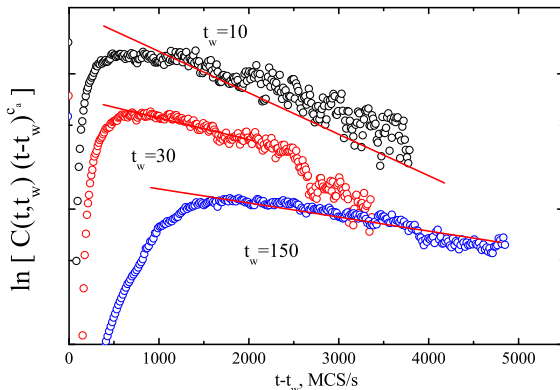


Рис. 21. Автокорреляционная функция $C(t, t_w)$ для $N = 4$, $t_w = 10$ при $m_0 \ll 1$, $t - t_w \gg t_w$

$$\tau_{\text{rel}} \sim L^z \quad (11)$$

t_w	$\tau_{\text{rel}}, \text{MCS/s}$	z
0	18 035	2.020(40)
10	59 114	2.264(19)
30	69 073	2.297(34)
150	127 510	2.423(23)

System		z	θ'
Коротковременная динамика, $N = 2$	MC	2.104(44)	0.182(26)
Коротковременная динамика, $N = 4$	MC	2.193(51)	0.194(30)
Оценка времени релаксации, $N = 4$	MC	2.020(40)	
2D Ising			
Okano, et al., 1997 [31]	MC		0.191(1)
Prudnikov, et al., 2006 [32]	RG	2.0842(39)	
Wang, Hu, 1997 [33]	MC	2.166(7)	
Nightingale and Blöte, 2000 [34]	MC	2.1667(5)	
Prudnikov, Markov, 1994 [35]	MC	2.24(7)	
Prudnikov, Vakilov, 1992 [36]	RG	2.277	
Kalle, 1984 [37]	MC	2.14(2)	
2D layered Ising metamagnetic			
Santos, Figueiredo, 2000 [38]	MC	2.09(4)	

³¹Okano, Sch ulke, Yamagishi and Zheng, Nucl. Phys. B, 1997;

³²Prudnikov, Prudnikov, Krinitsyn, Theor. Math. Phys, 2006;

³³Wang and Hu, Phys. Rev. E, 1997;

³⁴Nightingale and Blöte, Phys. Rev. B, 2000;

³⁵Prudnikov, Markov, Europhys. Lett., 1994;

³⁶Prudnikov, Vakilov, JETP, 1992;

³⁷Kalle, J. Phys. A, 1984;

³⁸Santos and Figueiredo, Phys. Rev. E, 2000;

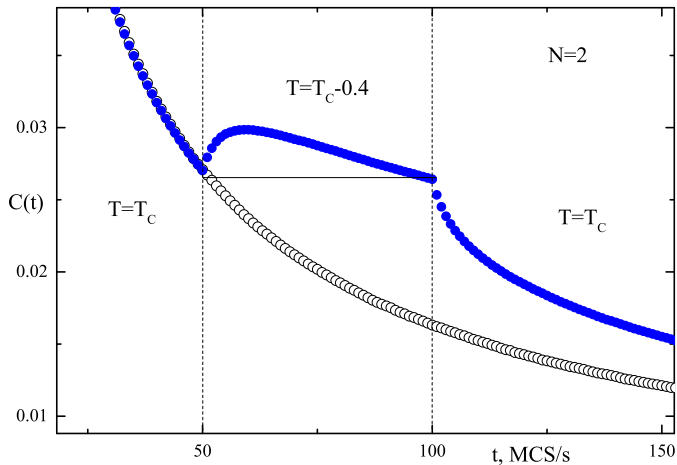


Рис. 22. Эффекты памяти в T -циклическом поведении автокорреляционной функции $C(t, tw)$ для $N = 2$ ($m_0 \ll 1$)

- Продемонстрирован набор интересных эффектов магнитного упорядочения в тонких пленках;
- Размерный переход от 2D к 3D с ростом толщины был продемонстрирован в анизотропных гейзенберговских пленках;
- Исследовано влияние начальных состояний на неравновесное критическое поведение изинговских пленок методом коротковременной динамики;
- Обнаружены эффекты памяти.

- Большое спасибо организаторам школы-конференции;
- Исследования были поддержаны проектом РФФ 14-12-00562;
- Были использованы численные ресурсы:
 - Суперкомпьютерного центра МГУ;
 - Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН;
 - IBM сервер S822.

Спасибо за внимание!