

УДК 537.622.4:538.9

## ЭФФЕКТЫ СТАРЕНИЯ В КРИТИЧЕСКОМ ПОВЕДЕНИИ АНИЗОТРОПНЫХ УЛЬТРАТОНКИХ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ПЛЕНОК

© 2023 г. М. А. Шляхтич<sup>1, 2, \*</sup>, П. В. Прудников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Сибирский федеральный университет”, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Омский государственный университет имени Ф.М. Достоевского”, Омск, Россия

\*E-mail: mshlyakhtich@sfu-kras.ru

Поступила в редакцию 28.09.2022 г.

После доработки 27.10.2022 г.

Принята к публикации 25.11.2022 г.

Представлены результаты исследования методом Монте-Карло неравновесных свойств ферромагнитных пленок Гейзенберга. Наблюдались эффекты старения при неравновесном критическом поведении. Расчеты проводились как из высокотемпературного, так и из низкотемпературного начального состояния. Получено характерное время корреляции, расходящееся при температуре перехода в термодинамическом пределе, как функция размера системы и времени ожидания.

DOI: 10.31857/S0367676522700788, EDN: NIATDJ

### ВВЕДЕНИЕ

Изучению различных свойств ультратонких пленок, в том числе и магнитных, посвящено большое количество экспериментальных работ [1–3]. Интерес к таким объектам очень высок из-за широкого спектра практического применения этих систем. Благодаря сильному влиянию формы и кристаллографической анизотропии подложки магнитное упорядочение в ультратонких ферромагнитных пленках очень сложно. В связи с этим теоретические расчеты спиновых моделей и разработка методов компьютерного моделирования имеют важное значение для рационализации и управления новыми экспериментами.

Большое количество явлений проявляются в статистических системах с медленной динамикой. К таким явлениям относятся: резкое замедление процессов релаксации, эффекты памяти, эффекты старения и т.д. Ввиду этого в последнее время системы с медленной динамикой вызывают большой теоретический и экспериментальный интерес [4–7]. После длительного времени система с медленной динамикой даже после малого возмущения не достигает равновесия. В связи с этим ее динамика не является инвариантной ни к переносу времени, ни к обращению времени, как это обычно происходит в тепловом равновесии. Эффекты старения проявляются во время этой бесконечной релаксации. Таким образом, двухвременные величины, такие как отклик и корреляционные функции, зависят от двух вре-

мен: времени ожидания  $t_w$  и времени наблюдения  $t - t_w$  ( $t > t_w$ ), и их затухание в зависимости от  $t$  происходит медленнее при больших  $t_w$ . В отличие от одновременных величин (например, параметра порядка), сходящихся к асимптотическим значениям в пределе больших времен, двухвременные величины явно характеризуются признаками старения.

### ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Были исследованы тонкие ферромагнитные пленки, описываемые гамильтонианом Гейзенберга:

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

где  $(S_i^x; S_i^y; S_i^z)$  – единичный вектор в направлении классического магнитного момента в узле  $i$  решетки;  $J > 0$  – константа ферромагнитного обменного взаимодействия;  $\Delta(N)$  – константа анизотропии;  $\Delta = 0$  соответствует изотропному случаю Гейзенберга;  $\Delta = 1$  – случай Изинга. На систему накладывались периодические граничные условия в плоскости пленки и свободные граничные условия в перпендикулярном направлении.

Моделирование проводилось для систем размером  $N_s = L \times L \times N$ , где  $N$  – число слоев в пленке, а  $L = 128$  – линейный размер слоя. Мы

использовали алгоритм Метрополиса для обновления спиновых конфигураций. Моделирование проводилось при критической температуре  $T_C = 1.15$  для  $N = 3$  монослоя (МС),  $T_C = 1.31$  для  $N = 5$  МС,  $T_C = 1.39$  для  $N = 7$  МС [8–10] и различных начальных состояниях  $m_0 = 1, m_0 = 0.0001 \ll 1$ .

Эффективная константа анизотропии  $\Delta(N)$  [8, 9] в зависимости от толщины пленки  $N$  была выбрана из экспериментальных исследований температуры Кюри  $T_C$  для тонких пленок Ni(111)/W(110) [10] с различной толщиной пленки Ni. При этом максимальное значение критической температуры соответствует максимальному значению константы анизотропии  $\Delta(N) = 1$ . При дальнейшем росте толщины пленки константа анизотропии стремится к нулю. В данной работе расчеты проводились для  $\Delta(N = 3) = 0.636$ ,  $\Delta(N = 5) = 0.734$ ,  $\Delta(N = 7) = 0.816$ .

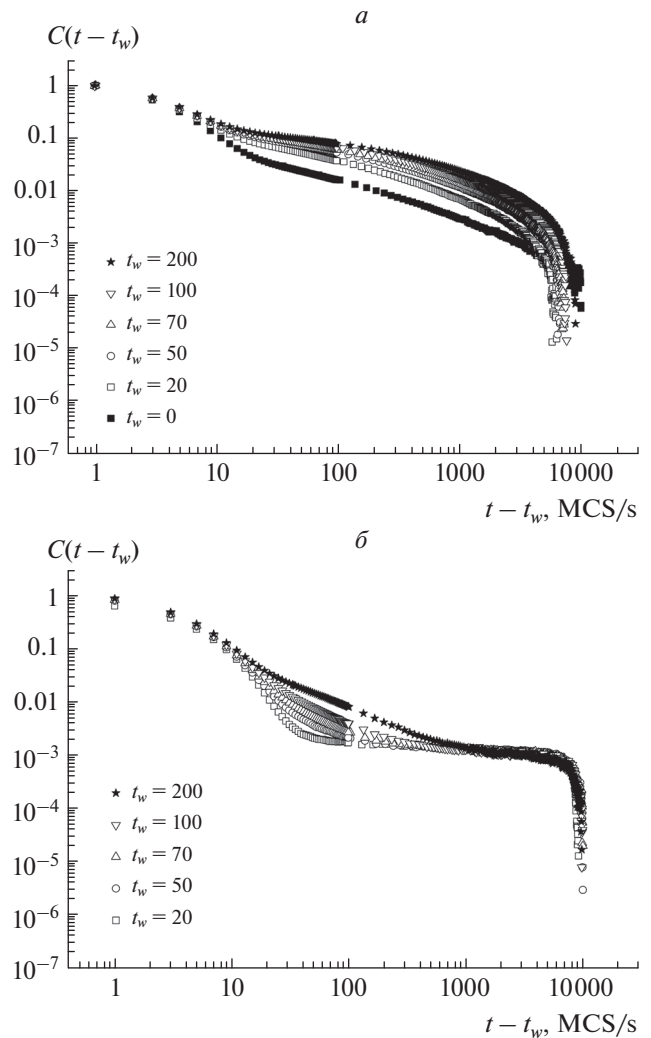
### МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

Для изучения явлений старения были рассчитаны временные зависимости двухвременной автокорреляционной функции

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i \bar{S}_i(t) \bar{S}_i(t_w) \right\rangle - m(t)m(t_w), \quad (2)$$

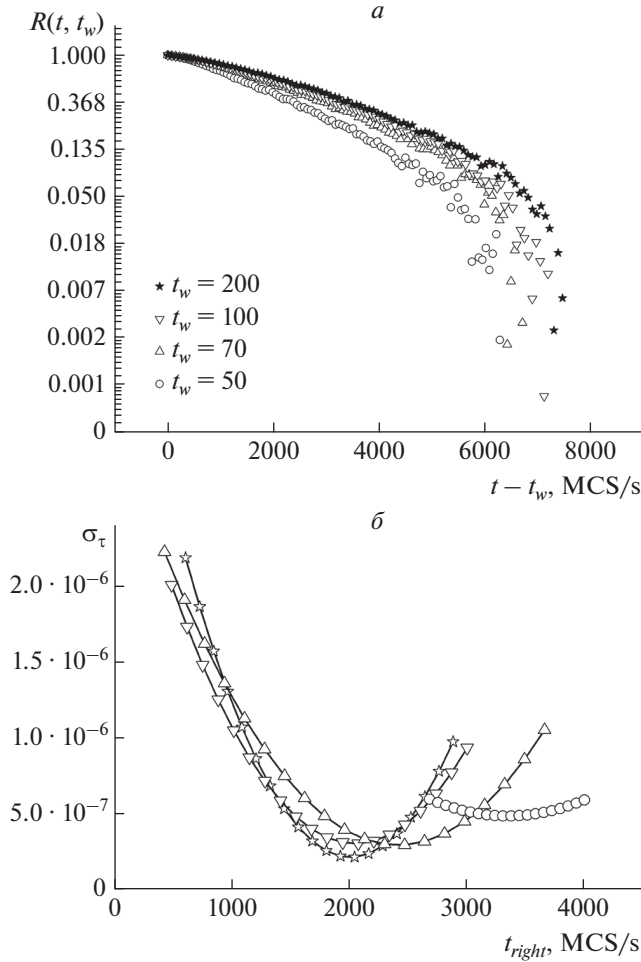
где  $t$  – время, прошедшее с момента приготовления образца до измерения величины;  $m(t)$  – намагниченность, которая является параметром порядка для ферромагнитной пленки. На рис. 1 данные для  $C(t, t_w)$  построены в зависимости от времени наблюдения  $t - t_w$  для тонкой гейзенберговской пленки с толщиной  $N = 3$  МС для различных значений времени ожидания  $t_w = 200, 100, 70, 50, 20, 0$  шагов Монте-Карло на спин (MCS/s). Моделирование проводилось при критической температуре из высокотемпературного начального состояния  $m_0 \ll 1$  (рис. 1а) и низкотемпературного начального состояния  $m_0 = 1$  (рис. 1б).

Автокорреляционная функция наглядно демонстрирует наличие трех характерных режимов: квазиравновесного режима в моменты времени  $(t - t_w) \ll t_w$  и неравновесного режима в моменты времени  $(t - t_w) \gg t_w$ . В моменты времени  $(t - t_w) \sim t_w$  имеет место кроссоверный режим с зависимостью корреляционных характеристик от времени ожидания [11]. При меньших значениях времени  $t_w$  автокорреляция быстро релаксирует до плато  $C_{eq} \sim m_{eq}^2 \sim t^{-2\beta/\nu z}$  и только при больших значениях  $t - t_w$  спадает до нуля. Более того, для разных значений  $t_w$  данные характеризуются разными законами убывания, что означает нарушение временной инвариантности. Поведение автокорреляционной функции демонстрирует замед-



**Рис. 1.** Релаксация автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  для пленки толщиной  $N = 3$  МС при различных значениях времени ожидания  $t_w = 200, 100, 70, 50, 20, 0$  MCS/s из различных начальных состояний: высокотемпературного  $m_0 \ll 1$  (а) и низкотемпературного  $m_0 = 1$  (б).

ление процессов релаксации с увеличением  $t_w$ . Так, например, автокорреляционная функция спадает со значения 1 до 0.01 для  $t_w = 20$  за 659 MCS/s, для  $t_w = 50$  за 1146 MCS/s, для  $t_w = 70$  за 1419 MCS/s, для  $t_w = 100$  за 1805 MCS/s, для  $t_w = 200$  за 2546 MCS/s при моделировании из высокотемпературного начального состояния  $m_0 \ll 1$  (рис. 1а). При моделировании из низкотемпературного начального состояния  $m_0 = 1$  релаксация автокорреляционной функции со значения 1 до 0.01 происходит быстрее для  $t_w = 20$  за 22 MCS/s, для  $t_w = 50$  за 26 MCS/s, для  $t_w = 70$  за 31 MCS/s, для  $t_w = 100$  за 40 MCS/s, для  $t_w = 200$  за 78 MCS/s (рис. 1б). Вме-

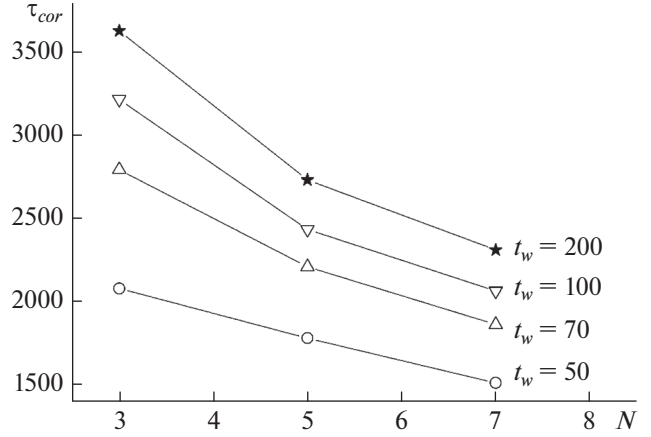


**Рис. 2.** Безразмерная динамическая корреляционная функция  $R(t, t_w)$  (a) для тонких пленок с  $N = 3$  МС при различных временах ожидания  $t_w = 200, 100, 70, 50, 20$  MCS/s и соответствующая среднеквадратичная погрешность аппроксимации (б) от выбранного временного интервала.

сте с упомянутой выше медленной динамикой это нарушение временной инвариантности является вторым определяющим свойством стареющих систем. Таким образом моделирование динамического процесса из полностью упорядоченного состояния наиболее предпочтительно из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты.

Для оценки времени корреляции наших систем мы рассчитываем безразмерную динамическую корреляционную функцию  $R(t, t_w)$  [12] для различной толщины пленки  $N = 3, 5, 7$  МС и для различного времени ожидания  $t_w = 20, 50, 70, 100, 200$  MCS/s:

$$R(t, t_w) = \frac{C(t, t_w)}{\sqrt{\left\langle \left( \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \bar{S}_i(t) \bar{S}_i(t_w) \right)^2 \right\rangle}}. \quad (3)$$



**Рис. 3.** Зависимость времени корреляции от толщины пленки и времени ожидания.

Зависимости безразмерной динамической корреляционной функции  $R(t, t_w)$  от времени представлены на рис. 2a. При достаточно больших временах  $R(t, t_w)$  убывает экспоненциально:

$$R(t, t_w) \sim \exp(-t/\tau_{cor}). \quad (4)$$

По наклону временной зависимости безразмерной динамической корреляционной функции  $R(t, t_w)$  (рис. 2a) построенной в логарифмическом масштабе можно оценить значение времени корреляции  $\tau_{cor}$ . Минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации (рис. 2б) для  $N = 3$  достигается на интервале  $[700; t_{right}]$  для  $t_{right} = 2000$  при  $t_w = 200$ , для  $t_{right} = 2000$  при  $t_w = 100$ , для  $t_{right} = = 2400$  при  $t_w = 70$  и для  $t_{right} = 3500$  при  $t_w = 50$ .

Значения времени корреляции представлены на рис. 3. Величина времени корреляции  $\tau_{cor}$  демонстрирует наличие эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках. Увеличение возраста системы  $t_w$  приводит к увеличению значения  $\tau_{cor}$ .

В спиновых системах при фазовых переходах второго рода проявляются эффекты критического замедления, т.е. увеличение времени корреляции  $\tau_{cor}$  при приближении к критической точке  $T_c$ . Степенной характер асимптотической зависимости  $\tau_{cor}$  определяется универсальным динамическим критическим показателем  $z$ :

$$\tau_{cor} \sim |T - T_c|^{-\nu z}, \quad (5)$$

где  $\nu$  – критический показатель корреляционной длины.

Для независимой оценки динамического критического индекса  $z$  в данной работе был проведен расчет кумулянта  $F_2(t)$ :

$$F_2(t) = \frac{m^{(2)}(t)|_{m_0=0}}{m^2(t)|_{m_0=1}} \sim t^{d/z}, \quad (6)$$

где  $d$  – размерность системы.

Временная зависимость кумулянта  $F_2(t)$  позволяет определить отношение  $d/z$  по углу наклона кривой, построенной в двойном логарифмическом масштабе. Были получены следующие значения данного отношения для различных толщин пленок  $d/z = 1.0224(2)$  для  $N = 3$  МС,  $d/z = 1.0146(3)$  для  $N = 5$  МС,  $d/z = 1.0985(2)$  для  $N = 7$  МС.

Значение самого динамического критического индекса  $z$  было получено с использованием эффективной размерности системы  $d_{eff}$ , которая была получена из гиперскейлингового соотношения  $\gamma/\nu + 2\beta/\nu = d_{eff}$ . Используя значения статических критических индексов из [8] была найдена эффективная размерность системы  $d_{eff} = 2.007$  (125) для пленок с толщиной  $N = 3$  МС,  $d_{eff} = 1.992$  (98) для пленок с толщиной  $N = 5$  МС,  $d_{eff} = 2.158$  (135) для пленок с толщиной  $N = 7$  МС. Были получены соответствующие значения динамического критического индекса  $z = 1.827(99)$  для  $N = 3$ ,  $z = 1.963(192)$  для  $N = 5$ ,  $z = 2.111(131)$  для  $N = 7$ . Таким образом пленки с толщиной  $N = 3$ ,  $N = 5$  демонстрируют критическое поведение, характерное для квазидвумерных систем.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В критическом поведении тонких гейзенберговских пленках проявляются эффекты старения. На это указывает временное поведение автокорреляционной функции. С увеличением времени ожидания  $t_w$  происходит замедление процессов релаксации в системах. Выполнена оценка времени корреляции. Увеличение возраста системы  $t_w$  приводит к увеличению значения  $\tau_{cor}$ . Величина времени корреляции  $\tau_{cor}$  демонстрирует наличие эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках.

При уменьшении размеров магнитных систем происходит усилением флуктуаций спиновой плотности и проявляются эффектов критического замедления. Таким образом эффекты старения проявляются в неравновесном поведении низко-размерных магнитных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (договор 0741-2020-0002) и Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект № МД-2229.2020.2). Вычислительные исследования поддержаны за счет ресурсов, предоставленных Центром коллективного обслуживания “ЦОД ДВО РАН” (Хабаровск) [13].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Vélez S., Golovach V.N., Gomez-Perez J.M. et al.* // Phys. Rev. B. 2019. V. 100. Art. No. 180401(R).
2. *Tang M., Zhao B., Zhu W. et al.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2018. V. 10. No. 5. P. 5090.
3. *Zanjani S.M., Onbaşlı M.C.* // J. Magn. Magn. Mater. 2020. V. 499. Art. No. 166108.
4. *Arceri F., Landes F.P., Berthier L., Biroli G.* Encyclopedia of complexity and systems science. Springer, 2021. P. 1.
5. *Baity-Jesi M., Calore E., Cruz A. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120. Art. No. 267203.
6. *Bag P., Baral P.R., Nath R.* // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. Art. No. 144436.
7. *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Мальяренко П.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 107. № 9. С. 595; *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A., Malyarenko P.N.* // JETP Lett. 2018. V. 107. No. 9. P. 569.
8. *Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. № 7. С. 501; *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Medvedeva M.A.* // JETP Lett. 2014. V. 100. No. 7. P. 446.
9. *Prudnikov P.V., Menshikova M.A. et al.* // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 387. P. 77.
10. *Medvedeva M.A., Prudnikov P.V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2014. V. 510. Art. No. 012024.
11. *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Krinitsyn A.S. et al.* // Phys. Rev. E. 2010. V. 81. Art. No. 011130.
12. *Bhatt R.N., Young A.P.* // Europhys. Lett. 1992. V. 20. No. 1. P. 59.
13. *Sorokin A.A., Makogonov S.V., Korolev S.P.* // Sci. Tech. Inf. Process. 2017. V. 44. No. 4. P. 302.

## Aging effects in critical behavior of Heisenberg anisotropic ultrathin films

**M. A. Shlyakhtich<sup>a, b, \*</sup>, P. V. Prudnikov<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041 Russia

<sup>b</sup> Dostoevsky Omsk State University, Omsk, 644077 Russia

\*e-mail: mshlyakhtich@sfu-kras.ru

We present the results of Monte-Carlo studies of the non-equilibrium properties of ferromagnetic Heisenberg films. Aging effects were observed in non-equilibrium critical behavior. The calculations were carried out for both high-temperature and low-temperature initial states. The characteristic correlation time, which diverges at the transition temperature in the thermodynamic limit, was obtained as a function of system size and waiting time.