УДК 538.9

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПОВЕРХНОСТНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2020 г. С. В. Белим^{а, b,*}

^аОмский государственный технический университет, Омск, 644050 Россия ^bСибирский государственный автомобильно-дорожный университет, Омск, 644080 Россия *e-mail: sbelim@mail.ru

Поступила в редакцию 10.01.2020 г. После доработки 20.02.2020 г. Принята к публикации 25.02.2020 г.

В статье проведено компьютерное моделирование поверхностного фазового перехода в полуограниченных антиферромагнитных системах под влиянием внешнего магнитного поля. Рассмотрены случаи различных значений поверхностного обменного интеграла, а также обменного интеграла взаимодействия поверхностных спинов с первым подповерхностным слоем. Показано, что для поверхностного фазового перехода, как и для объемного перехода, температура Нееля убывает с ростом напряженности магнитного поля по квадратичному закону. Скорость убывания температуры перехода определяется отношением обменных интегралов на поверхности и в объеме системы. Для каждого отношения обменных интегралов существует предельное значение напряженности магнитного поля, выше которого поверхность системы не переходит в антиферромагнитную фазу. При этом предельное значение магнитного поля для поверхностного перехода не ниже аналогичного значения для основного объема системы. Вследствие этого возможно существование интервала значений напряженности магнитного поля, в котором возможно антиферромагнитное упорядочивание спинов только в тонком приповерхностном слое. Трикритическая точка на фазовой диаграмме системы наблюдается при одном и том же значении отношения обменных интегралов независимо от напряженности магнитного поля. Трикритическая температура также убывает по квадратичному закону с ростом напряженности магнитного поля.

Ключевые слова: поверхностный фазовый переход, антиферромагнетизм, метод Монте-Карло. **DOI:** 10.31857/S1028096020110047

1. ВВЕДЕНИЕ

Внешнее магнитное поле оказывает существенное влияние на фазовый переход в антиферромагнетиках. Одним из наблюдаемых эффектов является снижение температуры Нееля при увеличении внешнего магнитного поля. Впервые в грубом приближении кривая зависимости температуры Нееля для двумерной и трехмерной моделей Изинга была получена в работе [1]. Авторы показали, что зависимость носит квадратичный характер. В статье [2] было получено аналитическое выражение, описывающее поведение температуры Нееля T_N в слабом магнитном поле H:

$$T_N(H) = T_N[1 - 0.012(mH/J)^2 + O(H^4)]$$

Для сильных магнитных полей зависимость напряженности магнитного поля от температуры фазового перехода была вычислена в работе [3]:

$$H = H_C - T_N \ln 2 + \mathcal{O}(T_N).$$

Уточненные результаты для поведения температуры Нееля вблизи значения H = 0 были получены [4]:

$$T_N(H) = T_N(1 - 0.038023259H^2).$$

В этой же работе для восприимчивости было найдено выражение:

$$\chi = 0.014718006H^2 \ln(1/t), \ (t = T/T_N).$$

На основе результатов компьютерного моделирования [5-8] была построена фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле (рис. 1).

Фазовая диаграмма антиферромагнитной системы в магнитном поле. AFM — область антиферромагнитной фазы.



Рис. 1. Фазовая диаграмма антиферромагнитной системы в магнитном поле. AFM — область антиферромагнитной фазы.

Для полуограниченных систем наличие свободной поверхности приводит к изменению фазовой диаграммы. Температура упорядочивания спинов на свободной поверхности может отличаться от температуры Нееля для основного объема системы. Это смещение обусловлено двумя факторами. Прежде всего, на поверхности спин имеет меньшее количество соседей, что приводит к уменьшению энергии, необходимой для опрокидывания спина. С другой стороны, величина обменного взаимодействия между поверхностными спинами может отличаться от обменного взаимодействия в объеме системы, что также сказывается на энергии, необходимой для переворачивания спина. В результате в системе может наблюдаться поверхностный фазовый переход, температура которого T_S превышает температуру Нееля T_N [9–11]. При температуре T_S система переходит из полностью неупорядоченной фазы в поверхностно-упорядоченную объемно-неупорядоченную фазу. Поверхностный фазовый переход в антиферромагнитных системах был исследован в рамках теоретико-полевого подхода [12–14] и методом компьютерного моделирования [15-17]. В этих работах показано, что параметром, определяющим температуру поверхностного фазового перехода, является отношение обменного интеграла *J*_S взаимодействия поверхностных спинов к обменному интегралу J_B взаимодействия спинов в объеме системы $R = J_s/J_B$. Поверхностный фазовый переход наблюдается при *R* > 1.55. При значении *R_S* = 1.55 на фазовой диаграмме расположена трикритическая точка, фазовый переход в которой получил название специального. В работах [16, 17] показано, что на вид фазовой диаграммы может оказывать влияние учет отличия обменного интеграла J_{SB} взаимодействия поверхностного слоя с первым подповерхностным слоем спинов.

В ряде работ экспериментально [18, 19] и на основе расчетов из первых принципов [20, 21] показано, что значение J_{SB} может отличаться как от J_S , так и от J_B , при этом выполняется неравенство $J_B \leq J_{SB} \leq J_S$. Увеличение J_{SB} приводит к смещению положения трикритической точки, в частности, при $J_{SB} = J_S$ специальный переход происходит при $R_S = 1.3$.

Как было показано выше внешнее магнитное поле оказывает существенное влияние на фазовые переходы в бесконечных антиферромагнитных системах. Однако влияние магнитного поля на поверхностный фазовый переход в полуограниченных антиферромагнитных системах остается неисследованным. Целью данной статьи является исследование поверхностного фазового перехода в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле методом компьютерного моделирования.

2. ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ

Свободная энергия полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга с учетом отличия величины обменного интеграла для поверхностных спинов и магнитного поля имеет вид:

$$F = -J_B \sum_{B} S_i S_j - J_S \sum_{S} S_i S_j - J_{SB} \sum_{SB} S_i S_j + \mu H_0 \sum S_i.$$

Здесь S_i — значения спина в *i*-ом узле (+1/2 или -1/2), H_0 – напряженность внешнего магнитного поля, µ – магнетон Бора, *J*_B – объемный обменный интеграл, J_S – поверхностный обменный интеграл, *J*_{SB} – обменный интеграл взаимодействия поверхностных спинов с первым подповерхностным слоем. В первых трех слагаемых суммирование осуществляется только по парам ближайших соседних спинов. В первом слагаемом свободной энергии вычисляется сумма только по парам спинов, расположенным в объеме системы. Во втором слагаемом суммируются только пары спинов, расположенных на поверхности системы. В третьем слагаемом производится суммирование по парам спинов, одни из которых расположен на поверхности системы, а втором в первом подповерхностном слое. Для удобства компьютерного моделирования будем рассматривать приведенные величины:

$$R = J_S / J_B$$
, $R_1 = J_{SB} / J_B$, $H = \mu H_0 / J_B$.

В этом случае температура *Т* также будет приведенной безразмерной величиной и измеряться в

единицах J_B/k , где k — постоянная Больцмана. Свободная энергия системы примет вид:

$$F/J_B = -\sum_B S_i S_j - R \sum_S S_i S_j + R \sum_S S_i S_j - R \sum_S S_i - R \sum_S S_i$$

Компьютерное моделирование осуществлялось для трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с простой кубической решеткой. Использовался алгоритм Метрополиса. Решетка имела линейные размеры $L \times L \times 2L$. Свободная поверхность определялась уравнением z = 0, спины системы располагались в полупространстве $z \ge 0$. Использовались циклические граничные условия. Для плоскости z = 2L соседней считалась плоскость z = L.

Для исследования процессов упорядочивания антиферромагнитной системы было использовано два параметра порядка. Первый параметр порядка m описывает объемное антиферромагнитное упорядочение и вычисляется как шахматная намагниченность спинов в основном объеме системы. Второй параметр порядка m_S описывает поверхностное упорядочивание и вычисляется как шахматная намагниченность на свободной поверхности системы.

Для определения температуры фазового перехода использовалась теория конечноразмерного скейлинга [22]. Для систем с различным линейным размером *L* вычислялась зависимость куммулянтов Биндера четвертого порядка от температуры *T* [22]:

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

Угловыми скобками обозначено термодинамическое усреднение по различным состояниям системы. Как следует из теории конечноразмерного скейлинга [22] значение куммулянтов Биндера в точке фазового перехода не зависит от размера система.

Таким образом, температура фазового перехода может быть найдена как точка пересечения графиков зависимости куммулянтов Биндера от температуры для систем различного размера. На основе зависимостей U от T определялась температура Нееля T_N . Исходя из графиков зависимости U_S от T определялась температура поверхностного фазового перехода T_S .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Компьютерное моделирование проводилось для систем с линейными размерами от L = 20 до L = 36 с шагом $\Delta L = 4$. Количество шагов Монте-



Рис. 2. Графики зависимости температуры поверхностного фазового перехода от отношения обменных интегралов $R = J_S/J_B$ при $R_1 = R = J_S/J_B = 1$.

Карло на спин равнялось 8×10^5 . Отношение обменных интегралов $R = J_S/J_B$ изменялось от R = 1.0до R = 2.0 с шагом $\Delta R = 0.1$. Для второго отношения обменных интегралов $R_1 = J_S/J_{SB}$ рассматривались два предельных значения $R_1 = 1.0$ и $R_1 = R$. Значение приведенной напряженности магнитного поля изменялось от H = 0.0 до H = 4.0 с шагом $\Delta H = 0.5$. Для каждого набора значений (R, R_1, H) определялась величина температуры Нееля T_N и температуры поверхностного фазового перехода T_s .

Результаты компьютерного эксперимента показали, что для температуры поверхностного фазового перехода, как и для температуры Нееля, наблюдается квадратичная зависимость от напряженности внешнего магнитного поля. Для случая, когда второе отношение обменных интегралов $R_1 = 1.0$ трикритическая точка на фазовой диаграмме системы наблюдается при R = 1.55 для всех значений напряженности внешнего магнитного поля. Откуда следует, что при $R \le 1.55$ температура поверхностного фазового перехода совпадает с температурой Нееля. Во втором предельном случае положение трикритической точки остается неизменным при R = 1.3 для всех значений напряженности магнитного поля Н. Отсюда можно сделать вывод о не влиянии магнитного поля на общий вид фазовой диаграммы системы и положение трикритической точки. Графики зависимости температуры поверхностного фазового перехода от напряженности магнитного поля при различных отношениях обменного интеграла представлены на рис. 2 ($R_1 = 1$) и 3 ($R_1 = R$) (рис. 2).

Зависимость температуры поверхностного фазового перехода при R > 1.55 от напряженности



Рис. 3. Графики зависимости температуры поверхностного фазового перехода от отношения обменных интегралов $R = J_S/J_B$ при $R_1 = J_S/J_B = R$.



Рис. 4. Графики зависимости температуры поверхностного фазового перехода при нулевом магнитном поле $T_0(R, R_1)$ от R при $R_1 = 1$ и $R_1 = R$.

магнитного поля может быть выражена с помощью формулы:

$$T_{S}(H, R, R_{\rm l}) = T_{0}(R, R_{\rm l})(1 - (H/H_{S}(R, R_{\rm l}))^{2}),$$

где $H_S(R, R_1)$ – предельное значение напряженности магнитного поля, выше которого поверхность системы не переходит в антиферромагнитное состояние, $T_0(R, R_1)$ – температура фазового перехода при нулевом магнитном поле (рис. 3).

Зависимости $T_0(R, R_1)$ от R при $R_1 = 1$ и $R_1 = R$ приведены на рис. 4.

Из результатов компьютерного эксперимента были получены зависимости предельной напряженности магнитного поля от соотношения обменных интегралов *R*:

$$H_{S}(R, R_{1} = 1) = \frac{1}{\sqrt{0.592 - 0.05R}}, \quad (R > 1.55),$$

$$H_{S}(R, R_{1} = R) = \frac{1}{\sqrt{0.127 - 0.05R}}, \quad (R > 1.3).$$

Для объемного фазового перехода $H_0 = 4.0$. Следует отметить, что H_S может принимать значения выше H_0 . Следовательно существует интервал значений напряженности магнитного поля, при которых антиферромагнитная фаза возможна только в приповерхностном слое, в объеме же системы она не реализуется.

4. ВЫВОДЫ

Из результатов, полученных в статье, можно сделать вывод о том, что магнитное поле оказывает такое же влияние на поверхностный фазовый переход в полуограниченных антиферромагнитных системах, как и на обычный переход в неограниченных системах. Температура поверхностного фазового перехода T_S убывает с ростом напряженности магнитного поля по квадратичному закону. При этом скорость убывания T_S зависит от отношения обменных интегралов R = $= J_{S}/J_{B}$ и $R_{1} = J_{SB}/J_{B}$. Для каждого значения R и R_{1} существует предельное значение напряженности магнитного поля H_s, при котором температура поверхностного антиферромагнитного перехода становиться нулевой. При напряженности магнитного поля выше *H*_S поверхностный антиферромагнитный фазовый переход невозможен. Следует отметить, что выполняется неравенство $H_0 \leq H_S$, где H_0 — предельное значение магнитного поля для основного объема системы. В системах с $J_{SB}/J_B = 1$ и $J_S/J_B > 1.55$ или $J_{SB}/J_B = J_S/J_B > 1.55$ неравенство становиться строгим $H_0 < H_S$. В этом случае в интервале значений $H_0 < H < H_S$ в системе возможна антиферромагнитная фаза только на поверхности системы. Так при R = 2.0 и $R_1 = 2.0$ предельные значения напряженности магнитного поля $H_0 = 4.0$ и $H_S = 6.085$. То есть H_S превышает Н₀ в 1.52 раза, значит интервал напряженности магнитного поля с исключительно поверхностным антиферромагнитным фазовым переходом может быть достаточно широким.

Эффект снижения температуры поверхностного фазового перехода в антиферромагнетиках под действием внешнего магнитного поля экспериментально исследовался в ряде работ. При этом постановка эксперимента состояла в наблюдении поверхностного фазового перехода под действием магнитного поля, направленного вдоль оси легкого намагничивания. Образец при фиксированной температуре помещался во внешнее магнитное поле, напряженность которого увеличивалась. При определенном значении напряжен-

2020

ности магнитного поля происходил фазовый переход.

Данное явление может быть объяснено снижением температуры поверхностного фазового перехода во внешнем магнитном поле, описанном в данной статье. Описанный эффект наблюдался для $La_{0.73}Ca_{0.27}MnO_3$ [23], MnF_2 [24], сверхрешетке Fe/Cr(211) [25, 26].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Domb C., Green M.S.* Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 3. Academic Press. London, 1974.
- Rapaport D.C., Domb C. //J. Phys.C. 1971. № 4(16). P. 2684.
- Mouller-Hartmann E., Zittartz J. // Z. Physik B. 1971. № 27(3). P. 261.
- 4. Monroe J.L. // Phys. Rev. E. 2001. № 64. P. 016126.
- 5. Wu X.N., Wu F.Y. // Phys. Lett. A. 1990. № 144. P. 123.
- 6. *Blote H.W.J., Wu X.N.* // J. Phys. A. 1990. № 23. P. L627.
- Wang X.-Z., Kim J.S. // Phys. Rev. Lett. 1997. № 78. P. 413.
- Tarasenko A.A., Jastrabik L., Nieto F., Uebing C. // Phys. Rev. B. 1999. № 59. P. 8252.
- 9. Каганов М.И. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 3. С. 1190.
- 10. Mills D.L. // Phys. Rev. 1971. V. 3. № 11. P. 3887.

- 11. Каганов М.И., Карпинская Н.С. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 6. С. 2143.
- 12. Diehl H.W. // J. Mod. Phys. B. 1997. V. 11. P. 3503.
- 13. Белим С.В. // ЖЭТФ. 2006. Т. 130. № 4. С. 702.
- 14. Белим С.В. // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. № 4. С. 884.
- 15. *Belim S.V., Trushnikova E.V.* // J. Physics: Conf. Series. 2017. № 944. P. 012011.
- 16. *Белим С.В., Трушникова Е.В.* // Физика металлов и металловедение. 2018. Т. 119. В. 5. С. 465.
- 17. Белим С.В., Трушникова Е.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 9. С. 102.
- Ruiz-Díaz P., Stepanyuk V.S. // J. Phys. D. Appl. Phys. 2014. № 47. P. 105006.
- 19. Brovko O.O., Ruiz-Díaz P., Dasa T.R. et al // J. Phys. Condens. Matter. 2014. № 26. P. 093001.
- Lin C.-Yu., Li J.-L., Hsieh Y.-H. // Phys. Rev. X. 2012. № 2. P. 021012.
- 21. *Ruiz-Díaz P., Dasa T.R., Stepanyuk V.S.* // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 267203.
- 22. Landau D.P., Binder K. // Phys. Rev. B. 1978. V. 17. P. 2328.
- 23. Wei Li, Kunkel H.P., Zhou X.Z. u dp. // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. V. 16. P. L109.
- 24. te Velthuis S.G.E., Jiang J.S., Bader S.D. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. P. 127203.
- 25. Wang R.W., Mills D.L., Fullerton E.E. et al. // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 920.
- Pini M.G., Rettori A., Betti P. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. V. 19. P. 136001.

Investigation of Magnetic Field Influence on Surface Phase Transition in Antiferromagnetics by Computer Simulation

S. V. Belim^{*a*, *b*, *}

^aOmsk State Technical University, Omsk, 644050 Russia

^bSiberian State Automobile and Highway University (SibADI), Omsk, 644080 Russia

*e-mail: sbelim@mail.ru

In the article computer modeling of surface phase transition in semi-infinite antiferromagnetic systems under the influence of external magnetic field is carried out. Cases of different values for surface exchange integral and exchange integral for interaction between surface spines and the first subsurface layer are considered. For surface phase transition, as for bulk transition, the Neel temperature decreases with increasing magnetic field intensity according to the quadratic law. The rate of transition temperature decrease is determined by the ratio of exchange integrals on the surface and in the bulk. For each ratio of exchange integrals, there is a magnetic field intensity limit above which the surface of the system does not transit into the antiferromagnetic phase. The limit value of the magnetic field for the surface transition is not lower than the same value for the bulk. There is an interval of magnetic field intensity in which antiferromagnetic ordering of spines is possible only in a thin near-surface layer. The tricritical point on the system phase diagram is present at the same value of the exchange integrals ratio for all magnetic field intensity values. Tricritical temperature also decreases in quadratic law with increasing magnetic field intensity.

Keywords: surface phase transition, antiferromagnetic, Monte-Carlo methods.