

УДК 537.622.4:538.9

ЭФФЕКТЫ СТАРЕНИЯ В КРИТИЧЕСКОМ ПОВЕДЕНИИ АНИЗОТРОПНЫХ УЛЬТРАТОНКИХ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ПЛЕНОК

© 2023 г. М. А. Шляхтич^{1, 2, *}, П. В. Прудников²

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

²Федеральное 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: HIATDJ

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:

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

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-

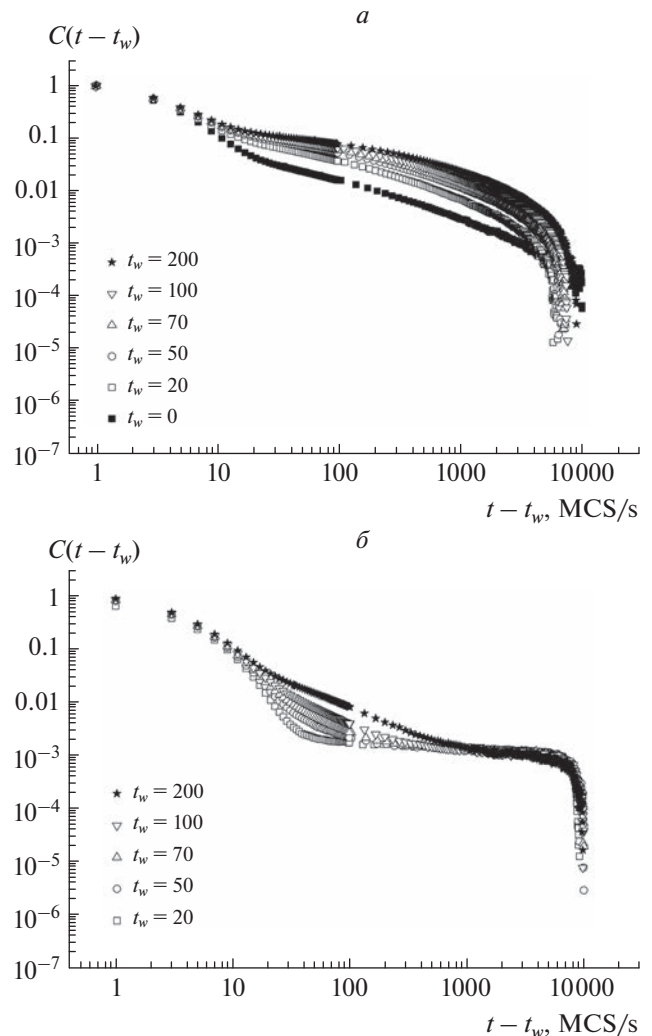


Рис. 1. Релаксация автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для пленки толщиной $N = 3$ МС при различных значениях времени ожидания $t_w = 200, 100, 70, 50, 20, 0$ MCS/s из различных начальных состояний: высокотемпературного $m_0 \ll 1$ (а) и низкотемпературного $m_0 = 1$ (б).

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-

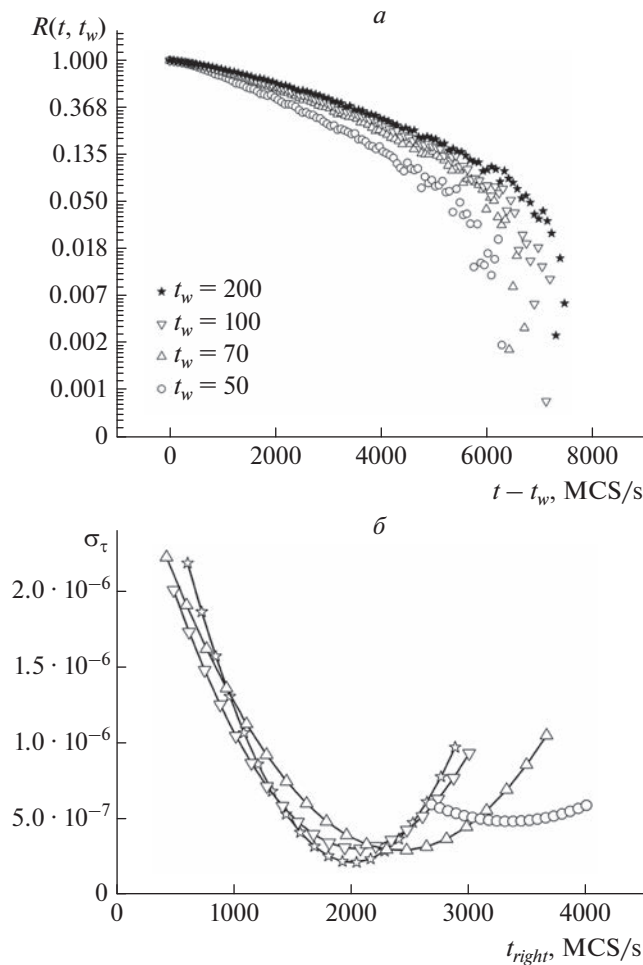


Рис. 2. Безразмерная динамическая корреляционная функция $R(t, t_w)$ (а) для тонких пленок с $N = 3$ МС при различных временах ожидания $t_w = 200, 100, 70, 50, 20$ MCS/s и соответствующая среднеквадратичная погрешность аппроксимации (б) от выбранного временного интервала.

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:

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

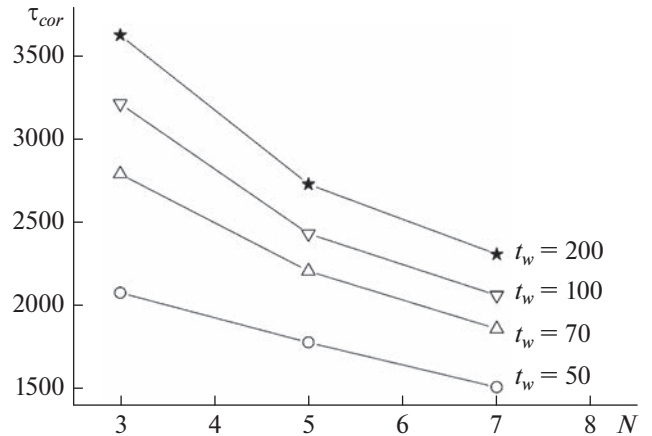


Рис. 3. Зависимость времени корреляции от толщины пленки и времени ожидания.

Зависимости безразмерной динамической корреляционной функции $R(t, t_w)$ от времени представлены на рис. 2а. 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. 2а) построенной в логарифмическом масштабе можно оценить значение времени корреляции τ_{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 τ_{cor} демонстрирует наличие эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках. Увеличение возраста системы t_w приводит к увеличению значения τ_{cor} .

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

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

где ν — 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 $\gamma/\nu + 2\beta/\nu = d_{\text{eff}}$. Используя значения статических критических индексов из [8] была найдена эффективная размерность системы $d_{\text{eff}} = 2.007(125)$ для пленок с толщиной $N = 3$ МС, $d_{\text{eff}} = 1.992(98)$ для пленок с толщиной $N = 5$ МС, $d_{\text{eff}} = 2.158(135)$ 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 τ_{cor} . Величина времени корреляции τ_{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. Véléz 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^{a, b, *}, P. V. Prudnikov^b

^a Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041 Russia

^b 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.