Письма в ЖЭТФ, том 100, вып. 7, с. 501 – 505

Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках

П. В. Прудников[1)], *В. В. Прудников, М. А. Медведева*

Омский государственный университет им. Достоевского, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 18 августа 2014 г.

Методами Монте-Карло проведено численное исследование размерных эффектов в критических свойствах многослойных гейзенберговских пленок. Для пленок различной толщины учтено влияние анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки. Рассчитанные значения критических индексов демонстрируют размерный переход от двумерных к трехмерным свойствам пленок с увеличением числа слоев. В пленках с толщинами, соответствующими кроссоверной области, выявлен спин-ориентационный переход в планарную фазу.

DOI: 10.7868/S0370274X14190060

В последнее время большое внимание уделяется изучению свойств тонких магнитных пленок [1]. Подобный интерес вызван прежде всего тем, что изучение физических свойств ферромагнитных пленок способствует решению фундаментальных проблем физики магнитных явлений, развитию теории ферромагнетизма [2]. Изучение тонких пленок существенно расширяет представления о физической природе анизотропии ферромагнетиков и позволяет выявить разнообразные процессы перемагничивания, обнаружить новые физические явления [3]. В пленках могут быть реализованы структурные состояния, которые трудно или невозможно получить в объемных образцах. Это существенно расширяет возможности исследования связи между структурными характеристиками и физическими свойствами магнитных материалов.

Изучение физических свойств тонких ферромагнитных пленок также актуально с точки зрения их технологического применения. Важнейшим применением пленок является их использование в качестве магнитной среды для записи и хранения информации в запоминающих устройствах. Магнитные пленки имеют особенности, благодаря которым их использование может способствовать повышению плотности записи информации до 1 ТБ/дюйм^2 [4]. В этом плане очень важно понимание процессов изменения намагниченности в тонких магнитных пленках с изменением температуры, особенно при температурах, близких к температуре Кюри.

Критические свойства ультратонких пленок чувствительны к эффектам анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки. Учет данных эффектов в многослойных системах может приводить к смене критического поведения.

В настоящей работе проводилось численное исследование тонких ферромагнитных пленок при применении к описанию их физических свойств анизотропной модели Гейзенберга с гамильтонианом [5]

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

где $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор в узле i, $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, Δ – параметр анизотропии. Значение $\Delta = 0$ соответствует изотропной модели Гейзенберга, а $\Delta = 1$ – модели Изинга.

Микроскопическая природа анизотропии в пленках Fe, Co, Ni и ее зависимость от толщины пленки в единицах числа моноатомных слоев N определяются влиянием кристаллического поля подложки, одноионной анизотропией, а также диполь-дипольным взаимодействием магнитных моментов атомов в пленке и их взаимной конкуренцией. Поэтому расчет эффектов анизотропии в магнитных пленках является очень сложной задачей. Эффективная зависимость параметра анизотропии $\Delta(N)$ от толщины пленки N выбиралась нами пропорциональной зависимости от N критической температуры для пленок Ni(111)/W(110) [6] с различным числом слоев. В аппроксимационной процедуре для зависимости $\Delta(N)$ использовался тот факт, что пленки Ni с большим числом слоев демонстрируют объемные критические свойства, соответствующие трехмерным изотропным гейзенберговским магнетикам [7, 8]. Результирующая зависимость $\Delta(N)$ представлена на рис. 1.

[1)] e-mail: prudnikp@univer.omsk.su

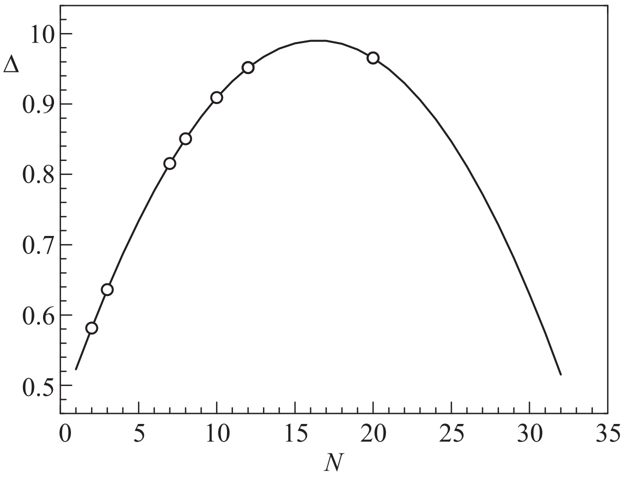

Рис. 1. Зависимость параметра анизотропии $\Delta(N)$ от толщины пленки N. Кружки соответствуют эксперименту для Ni(111)/W(110) [6]

Моделирование проводилось методом Монте-Карло для пленок с размерами $L \times L \times N$ с наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Величина $L \times L$ задавала число спинов в каждом слое, а N – число слоев в тонкой пленке. В данной работе рассматривались системы с линейными размерами $L = 32$, 48, 64 и числом слоев, изменяющимся в диапазоне $N = 1$ до 32. Расчеты характеристик пленки осуществлялись в температурном интервале $T = 0.01{-}5.01$ с шагом $\Delta T_{\text{step}} = 0.02$.

Для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с использованием алгоритма Свендсена–Ванга были исследованы температурные зависимости намагниченности

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

ее составляющих, т.е. намагниченности ориентированной по нормали к плоскости пленки:

$$m_z = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} S_i^z \right\rangle, \qquad (3)$$

намагниченности в плоскости пленки

$$m_{xy} = \left\langle \frac{1}{N_s} \left[\left(\sum_i^{N_s} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^y \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle, \qquad (4)$$

а также ориентационный параметр порядка [9, 10]

$$O_\alpha = \left\langle \left| \frac{n_h^\alpha - n_v^\alpha}{n_h^\alpha + n_v^\alpha} \right| \right\rangle. \qquad (5)$$

Здесь $N_s = NL^2$ – полное число спинов в пленке, угловые скобки означают статистическое усреднение, $\alpha \in \{x, y, z\}$, n_h и n_v – числа горизонтальных и вертикальных пар ближайших спинов с противоположно направленными S_z:

$$n_h^\alpha = \sum_{\mathbf{r}} \Big\{ 1 - \operatorname{sgn}\left[S^\alpha(r_x, r_y), S^\alpha(r_x + 1, r_y) \right] \Big\},$$
$$n_v^\alpha = \sum_{\mathbf{r}} \Big\{ 1 - \operatorname{sgn}\left[S^\alpha(r_x, r_y), S^\alpha(r_x, r_y + 1) \right] \Big\}. \qquad (6)$$

Характеристикой, наглядно демонстрирующей критическое поведение системы вблизи температуры фазового перехода, является магнитная восприимчивость

$$\chi_m \sim [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2. \qquad (7)$$

Зависимость $\chi_m(T)$ характеризует критические флуктуации намагниченности и их взаимодействие. По температуре в максимуме температурной зависимости $\chi_m(T)$ можно оценить температуру ферромагнитного фазового перехода в пленке и ее размерные изменения для различных толщин пленки.

Температурное поведение ориентационной восприимчивости

$$\chi_0 \sim [\langle O_\alpha^2 \rangle] - [\langle O_\alpha \rangle]^2 \qquad (8)$$

позволяет обнаружить область спин-ориентационного перехода из фазы, в которой намагниченность ориентирована по нормали к плоскости пленки, в фазу, для которой вектору намагниченности выгоднее ориентироваться в плоскости пленки.

Для уточнения значений критической температуры перехода из парамагнитной фазы в ферромагнитную определялась температурная зависимость кумулянта Биндера:

$$U_4(T, L) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle m^4(T, L) \rangle]}{[\langle m^2(T, L) \rangle]^2} \right). \qquad (9)$$

Скейлинговая зависимость кумулянта

$$U_4(T, L) = u \left[L^{1/\nu} (T - T_c) \right] \qquad (10)$$

позволяет определить температуру фазового перехода второго рода по координате пересечения температурных зависимостей $U_4(T, L)$ для различных L.

В данной работе для пленок рассматривалась конечноразмерная скейлинговая форма [11] для величин

$$\langle m(T, N) \rangle = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu} \tau, N),$$
$$\chi_m(T, N) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \tau, N), \qquad (11)$$

где γ, β и ν – эффективные критические индексы восприимчивости χ_m, намагниченности m и корреляционной длины ξ соответственно. Скейлинговая форма (11) определяет зависимость m и χ_m от линейного размера L и числа слоев N пленки. Она позволяет определить эффективные критические показатели из полученных температурных зависимостей этих величин.

Детальное исследование поведения намагниченностей m, m_{xy}, m_z и восприимчивостей χ_m, χ_0 для пленок с различной толщиной позволило выделить два типа фазовых превращений. Переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную наблюдается для всех рассмотренных N. Указанный переход сопровождается пиком магнитной восприимчивости χ_m. Для пленок с $N = 1$ и 9 это показано на рис. 2. Из

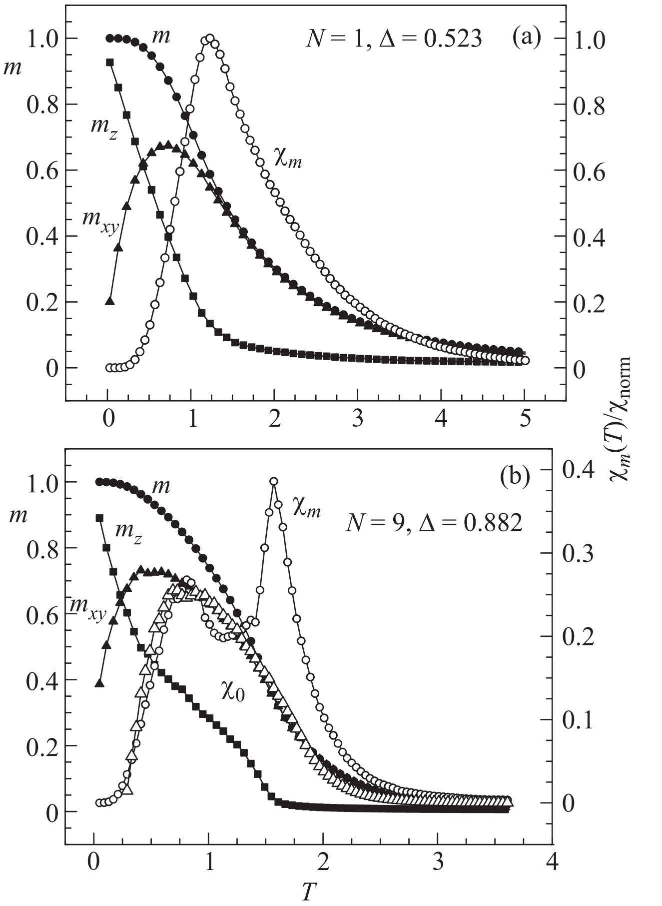

Рис. 2. Поведение намагниченностей $m(T)$, $m_z(T)$, $m_{xy}(T)$ и восприимчивостей $\chi_m(T)$, $\chi_0(T)$ для числа слоев $N = 1$ (a) и 9 (b)

представленных на рис. 2a данных видно, что хотя в области температуры фазового перехода m_z обращается в нуль, критическая природа перехода определяется флуктуациями m_z. Для монослойной пленки последнее подтверждается результатами работы [5]. Значения критических температур ферромагнитного фазового перехода были уточнены методом пересечения кумулянтов Биндера (9).

Для диапазона толщин пленки $N = 9$–22 на зависимости $\chi_m(T)$ возникает дополнительный пик в низкотемпературной области. Он связан со спин-ориентационным переходом, природа которого подтверждается поведением ориентационной восприимчивости χ_0. Пример поведения намагниченностей m, m_{xy}, m_z и восприимчивостей χ_m, χ_0 для $N = 9$ представлен на рис. 2b.

Принадлежность критического поведения пленки к тому или иному классу универсальности, а также эффективную размерность системы позволяет характеризовать набор значений критических индексов. Значение критического индекса ν может быть определено из скейлингового поведения кумулянтов Биндера (10), а значения критических показателей β/ν и γ/ν – на основе скейлинговых зависимостей (11) намагниченности m и восприимчивости χ от L при соответствующей критической температуре T_c.

Скейлинговые зависимости $f(m) = L^{\beta/\nu}m$ от $L^{1/\nu}(T_c - T)/T_c$, рассчитанные для пленок с линейными размерами $L = 32$, 48, 64 и толщинами от 2 до 5 монослоев, демонстрируют «коллапс» данных (рис. 3) на единой универсальной кривой. Это подтверждает правильность вычисления эффективных значений критических индексов.

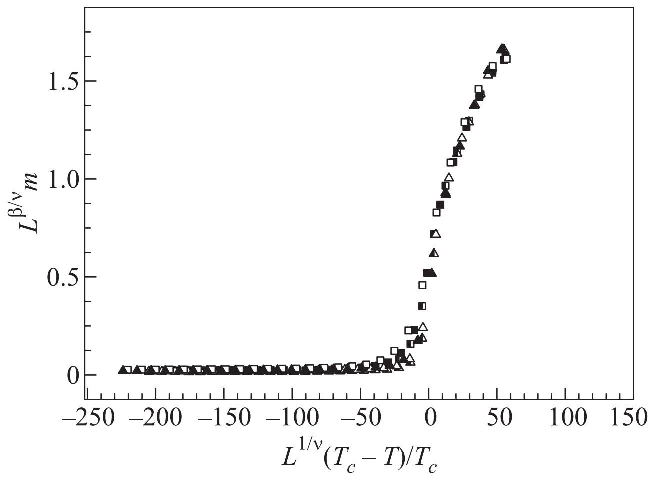

Рис. 3. Скейлинговая зависимость $f(m) = L^{\beta/\nu}m$ от $L^{1/\nu}(T_c - T)/T_c$

Анализ температурного поведения моделируемых величин для различного числа слоев пленки N показывает их разделение на несколько групп с различным асимптотическим критическим поведением.

Так, пленки с числом слоев $N \le 5$ демонстрируют поведение с критическими индексами, близкими к точным значениям для двумерной модели Изинга ($\beta_{\text{2D Ising}} = 1/8$, $\nu_{\text{2D Ising}} = 1$, $\gamma_{\text{2D Ising}} = 7/4$; рис. 4): $N = 2$ $\beta = 0.126(8)$, $\nu = 1.010(17)$, $\gamma = 1.816(69)$; при

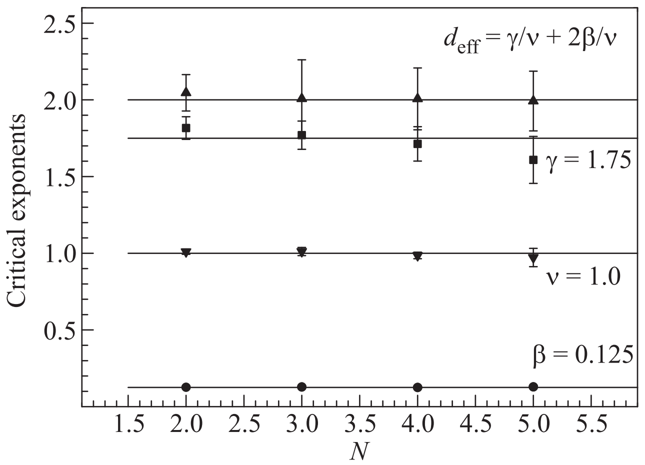

Рис. 4. Значения критических индексов ν, β, γ и эффективной размерности d_{eff}

$N = 3$ $\beta = 0.128(8)$, $\nu = 1.011(27)$, $\gamma = 1.770(94)$; при $N = 4$ $\beta = 0.126(9)$, $\nu = 0.986(21)$, $\gamma = 1.713(112)$; при $N = 5$ $\beta = 0.129(9)$, $\nu = 0.972(59)$, $\gamma = 1.609(150)$.

Основываясь на гиперскейлинговом соотношении $\gamma/\nu + 2\beta/\nu = d$, можно найти эффективную размерность системы d_{eff}. Для пленок с толщиной $N = 2$–5 d_{eff} принимает значение, близкое к 2 (см. рис. 4). Таким образом, пленки с $N/L \ll 1$ демонстрируют критическое поведение, характерное для квазидвумерных систем.

Полученные значения критического индекса $\beta(N)$, представленные на рис. 5, наглядно демонстрируют переход с ростом толщины пленки от поведения двумерной модели Изинга к поведению трехмерной модели Гейзенберга. Продемонстрированный в данной работе размерный переход от двумерных к трехмерным критическим свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки хорошо согласуется с экспериментальными исследованиями (см. рис. 2 в [6] и рис. 7 в [1]).

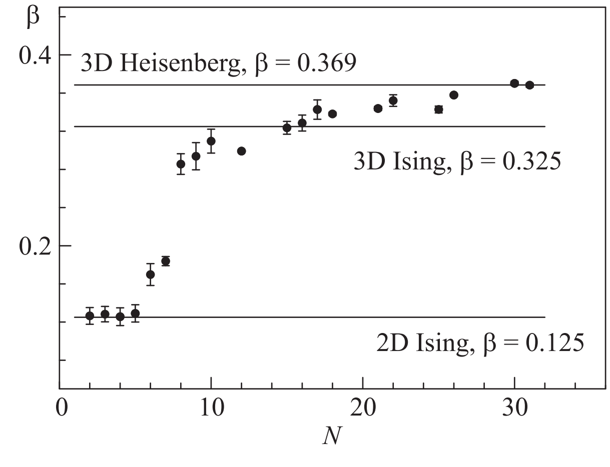

Рис. 5. Зависимость критического индекса β от толщины пленки N

На рис. 6 представлена итоговая фазовая диаграмма изменения состояния тонкопленоч-

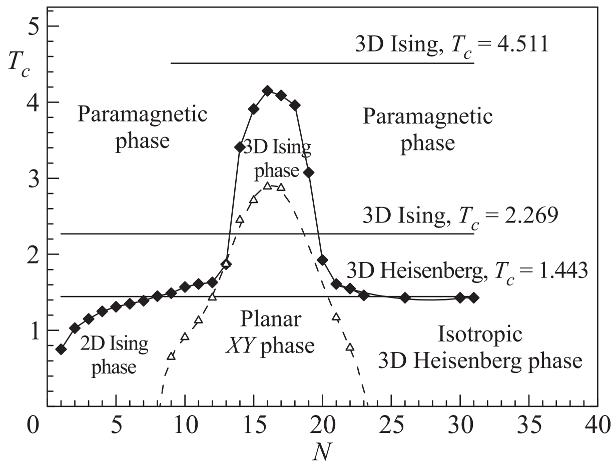

Рис. 6. Фазовая диаграмма для тонких пленок. Сплошная линия – переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную, штриховая – спин-ориентационный переход

ных систем при увеличении их толщины. Системы с $N \leqslant 5$ демонстрируют критическое поведение, соответствующее двумерной модели Изинга. Критическое поведение пленок с $6 \leqslant N \leqslant 12$ отвечает кроссоверной области перехода от двумерных свойств к трехмерным. Для пленок с толщиной $N = 13$–21 критические характеристики соответствуют трехмерной модели Изинга. В пленках с $9 \leqslant N \leqslant 22$ возникает спин-ориентационный переход в планарную фазу с критическим поведением, близким к поведению XY-модели. Выявление планарной фазы приводит к требованию существенного повышения необходимого набора данных при проведении статистического усреднения вычисляемых величин. При $N \geqslant 22$ пленки демонстрируют объемное критическое поведение, соответствующее изотропному гейзенберговскому магнетику. Полученные результаты подтверждаются значениями критических индексов, представленными в таблице.

Итак, в проведенном нами на основе анизотропной модели Гейзенберга численном исследовании магнитных свойств и критического поведения тон-

Значения критических индексов β, ν, γ

	β	ν	γ
$N = 2{-}5$	0.127(2)	0.995(10)	1.727(45)
2D-модель Изинга	0.125	1.0	1.750
$N = 6$	0.170(11)	0.974(62)	1.803(76)
8	0.286(11)	0.981(28)	1.586(52)
10	0.310(13)	0.839(32)	1.225(61)
$N = 15$	0.324(7)	0.632(21)	1.141(33)
16	0.329(8)	0.634(28)	1.182(53)
17	0.343(10)	0.658(27)	1.132(42)
3D-модель Изинга [12]	0.3249(6)	0.6299(5)	1.2331(13)
$N = 26$	0.358(1)	0.723(18)	1.396(121)
31	0.368(2)	0.759(40)	1.414(77)
3D-модель Гейзенберга [13]	0.3685(11)	0.710(2)	1.393(4)

ких пленок были выявлены размерные эффекты в поведении намагниченности и магнитной восприимчивости. Обнаружен спин-ориентационный переход в пленках с толщинами $N = 9{-}22$ монослоя. Рассчитаны критические индексы β, ν, γ для пленок с различными толщинами. Полученное усредненное значение индекса $\gamma = 1.73(5)$ для $N \leqslant 5$ хорошо согласуется с экспериментальным значением $\gamma = 1.75(2)$, измеренным для двухслойной пленки Fe/W(110) в работе [14]. Впервые выявлен переход с ростом толщины пленки от двумерных к трехмерным свойствам в поведении многослойных магнетиков.

Авторы выражают признательность Л.Н. Щуру, А.К. Муртазаеву и М.В. Мамоновой за обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 14-12-00562). Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, and G. Lauhoff, Rep. Prog. Phys. **71**, 056501 (2008).
2. J. A. C. Bland and B. Heinrich, *Ultrathin Magnetic Structures IV*, Berlin, Springer (2005), 257 p.
3. V. V. Ustinov, M. A. Milyaev, and L. I. Naumova, SPIN **04**, 1440001 (2014).
4. M. A. Seigler, W. A. Challener, E. Gage, N. Gokemeijer, G. Ju, B. Lu, K. Pelhos, C. Peng, R. E. Rottmayer, X. Yang, H. Zhou, and T. Rausch, IEEE Trans. Magn. **44**, 119 (2008).
5. K. Binder and D. P. Landau, Phys. Rev. B **13**, 1140 (1976).
6. Y. Li and K. Baberschke, Phys. Rev. Lett. **68**, 1208 (1992).
7. F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey, and R. F. Willis, Phys. Rev. B **49**, 3962 (1994).
8. A. Ney, A. Scherz, P. Poulopoulos, K. Lenz, H. Wende, K. Baberschke, F. Wilhelm, and N. B. Brookes, Phys. Rev. B **65**, 024411 (2001).
9. I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, and K. De'Bell, Phys. Rev. Lett. **75**, 950 (1995)
10. M. C. Ambrose and R. L. Stamps, Phys. Rev. B **87**, 184417 (2013).
11. O. Dillmann, W. Janke, M. Muller, and K. Binder, J. Chem. Phys. **114**, 5853 (2001).
12. W. Janke, D. A. Johnston, and R. Villanova, Physica A **281**, 207 (2000).
13. M. Hasenbush, J. Phys. A **34**, 8221 (2001).
14. M. J. Dunlavy and D. Venus, Phys. Rev. B **69**, 094411 (2004).