ЖЭТФ, 2013, том 143, вып. 4, стр. 695–700

КОРОТКОВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА МОДЕЛЕЙ МАГНИТНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ Fe_2/V_{13}

А. К. Муртазаев [a,b], *В. А. Мутайламов* [a*]

[a] *Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук*
367003, Махачкала, Россия

[b] *Дагестанский государственный университет*
367025, Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 24 октября 2012 г.

С использованием метода коротковременной динамики исследована критическая релаксация из низкотемпературного полностью упорядоченного состояния моделей магнитной сверхрешетки Fe_2/V_{13}. Изучены системы при трех соотношениях межслойного и внутрислойного обменных взаимодействий R. Исследованы частицы с периодическими граничными условиями, содержащие $N = 262144$ спинов. Вычисления проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло. Для трех соотношений R рассчитаны значения статических критических индексов намагниченности и радиуса корреляции, а также значения динамического критического индекса. Показано, что небольшое уменьшение обменного соотношения от $R = 1.0$ до $R = 0.8$ не оказывает существенного влияния на характер коротковременной динамики исследуемых моделей. Значительное уменьшение обменного соотношения до $R = 0.01$, когда возможен переход от трехмерного магнетизма к квазидвумерному, вызывает заметные изменения в динамическом поведении моделей железо-ванадиевых сверхрешеток.

DOI: 10.7868/S0044451013040095

1. ВВЕДЕНИЕ

В современной физике конденсированного состояния заметный интерес вызывает изучение металлических магнитных сверхрешеток, состоящих из чередующихся атомных слоев магнитных и немагнитных материалов. Возможность управления посредством внешнего воздействия такими фундаментальными свойствами сверхрешеток, как намагниченность, межслойное обменное взаимодействие, магнитосопротивление и т. д., позволяет создавать структуры с заранее заданными параметрами, что делает эти материалы уникальными объектами для практического применения и теоретического исследования [1–3]. Кроме того, магнитные сверхрешетки предоставляют идеальную возможность наблюдать на практике непрерывный кроссовер от трехмерного магнетизма к двумерному и обратно.

Ситуация с исследованием критических свойств магнитных сверхрешеток на данный момент является достаточно запутанной, поскольку имеющиеся результаты в этой области противоречивы [4, 5]. Экспериментальные исследования таких систем требуют получения материалов очень высокого качества. Создание высококачественных образцов и высокоточное исследование их критических свойств — задача чрезвычайно сложная. С этим, по-видимому, связаны и малое число работ, в которых магнитные сверхрешетки исследованы вблизи точки фазового перехода, и противоречивость полученных в них результатов. Поэтому в последнее время для изучения критических свойств магнитных сверхрешеток стали применяться также методы вычислительной физики. Так, в работах [6–8] исследовано статическое критическое поведение моделей магнитных сверхрешеток Fe/V, определены статические критические индексы, изучена их зависимость от соотношения внутрислойного и межслойного обменных взаимодействий. Методы вычислительной физики, такие как метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики, обладают рядом ценных преимуществ, связанных не только с их строгой математической обоснованностью и возможностью контроля за погреш-

*E-mail: vadim.mut@mail.ru

ностью в рамках самих методов, но и с тем, что они позволяют определить степень влияния на результаты того или иного параметра.

Не меньший интерес вызывает и исследование совершенно не изученного до сих пор динамического критического поведения магнитных сверхрешеток. Исследование динамических критических свойств является одной из актуальных задач современной статистической физики и физики фазовых переходов [9–11]. К настоящему времени в этой области достигнуты существенные успехи, обусловленные главным образом теоретическими и экспериментальными исследованиями. Тем не менее, построение строгой и последовательной теории динамических критических явлений на основе микроскопических гамильтонианов является одной из центральных проблем современной теории фазовых переходов и критических явлений, и эта проблема все еще далека от своего решения [9, 12].

Строгое теоретическое исследование критической динамики спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов — задача чрезвычайно трудная даже для простых спиновых моделей, ситуация же с исследованием критических свойств моделей магнитных сверхрешеток еще более сложная. При исследовании статических критических свойств моделей железо-ванадиевых сверхрешеток было установлено, что критические индексы зависят от величины параметра межслойного обменного взаимодействия [6–8]. В то же время скейлинговые соотношения между критическими индексами выполняются с очень высокой степенью точности. Такая ситуация не укладывается в рамки современной теории фазовых переходов и критических явлений. Поэтому исследование критической динамики не только представляет значительный самостоятельный интерес, но и может оказаться ключевым при объяснении возникших при изучении статических критических явлений трудностей.

В последнее время для изучения критической динамики моделей магнитных материалов стал успешно применяться метод коротковременной динамики (short-time dynamic) [13–16], в котором в рамках модели A (классификация классов универсальности динамического критического поведения Хальперина и Хоэнберга [17]) исследуется критическая релаксация магнитной модели из неравновесного состояния в равновесное. Традиционно считается, что универсальное скейлинговое поведение существует только в состоянии термодинамического равновесия. Однако было показано, что универсальное скейлинговое поведение для некоторых динамических систем может реализовываться на ранних этапах их временной эволюции из высокотемпературного неупорядоченного состояния в состояние, соответствующее температуре фазового перехода [18]. Такое поведение реализуется после некоторого отрезка времени, которое является достаточно большим в микроскопическом смысле, но остается малым в макроскопическом. Аналогичная картина наблюдается и в случае эволюции системы из низкотемпературного упорядоченного состояния [14, 15].

2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Используя метод ренормгрупп, авторы работы [18] показали, что вдали от точки равновесия после микроскопически малого отрезка времени для k-го момента намагниченности реализуется скейлинговая форма

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

где $M^{(k)}$ — k-й момент намагниченности, t — время, τ — приведенная температура, L — линейный размер системы, b — масштабный фактор, β и ν — статические критические индексы намагниченности и радиуса корреляции, z — динамический критический индекс, x_0 — новый независимый критический индекс, определяющий скейлинговую размерность начальной намагниченности m_0.

При старте из низкотемпературного упорядоченного состояния ($m_0 = 1$) в критической точке ($\tau = 0$), в предположении $b = t^{1/z}$ в уравнении (1), для систем с достаточно большими линейными размерами L теория предсказывает степенное поведение намагниченности в коротковременном режиме:

$$M(t) \propto t^{-c_1}, \quad c_1 = \beta/\nu z. \quad (2)$$

Логарифмируя обе части уравнения (2) и беря производные по τ при $\tau = 0$, получаем степенной закон для логарифмической производной:

$$\partial_\tau \ln M(t,\tau)|_{\tau=0} \propto t^{-c_{l1}}, \quad c_{l1} = 1/\nu z. \quad (3)$$

Для куммулянта Биндера $U_L(t)$, рассчитываемого по первому и второму моментам намагниченности, теория конечно-размерного скейлинга дает следующую зависимость при $\tau = 0$:

$$U_L(t) = \frac{M^{(2)}}{M^2} - 1 \propto t^{c_U}, \quad c_U = \frac{d}{z}. \quad (4)$$

Таким образом, в ходе одного численного эксперимента метод коротковременной динамики позволяет с использованием соотношений (2)–(4) определить значения трех критических индексов: β, ν и z. Кроме того, зависимости (2), построенные при различных значениях температуры, позволяют определить величину T_c по их отклонению от прямой линии в двойном логарифмическом масштабе.

3. МОДЕЛЬ

В предложенной в работах [6–8] микроскопической модели железо-ванадиевой сверхрешетки Fe_2/V_{13} каждый атом железа имеет четырех ближайших соседей из прилегающего слоя железа. Слои железа сдвинуты друг относительно друга на половину постоянной решетки по направлениям x и y. Магнитные моменты атомов железа упорядочены в плоскости xy. Схематически железо-ванадиевая сверхрешетка изображена на рис. 1.

Взаимодействие между ближайшими соседями внутри слоя носит ферромагнитный характер и определяется параметром обменного взаимодействия $J_\parallel$. Межслойное взаимодействие $J_\perp$ между магнитными слоями железа переносится электронами проводимости в немагнитной прослойке ванадия (РККИ-взаимодействие). В реальных сверхрешетках его величина и знак могут меняться в зависимости от расстояния между слоями железа, что, в свою очередь, зависит от количества адсорбированного в ванадиевую подсистему водорода [4, 5]. Поскольку точная зависимость РККИ-взаимодействия неизвестна, обычно при проведении численных экспериментов исследуется весь диапазон значений межслойного взаимодействия от $J_\perp = -J_\parallel$ до $J_\perp = J_\parallel$.

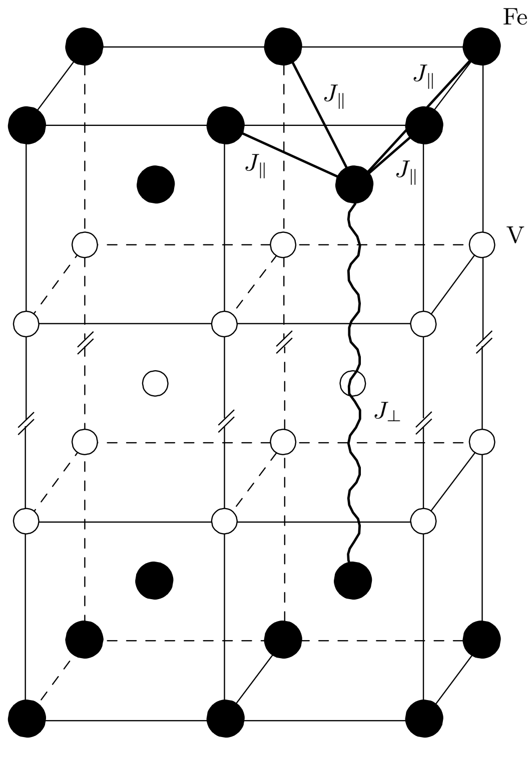

Рис. 1. Схематическое изображение железо-ванадиевой сверхрешетки Fe_2/V_{13}. Для наглядности приведены три монослоя ванадия из тринадцати

Поскольку в эксперименте расстояние между магнитными слоями существенно больше межатомного расстояния, каждый атом взаимодействует с усредненным моментом соседних слоев. Размер области усреднения является параметром модели. Наши исследования проведены для предельного случая, когда каждый атом взаимодействует лишь с одним ближайшим атомом из соседнего слоя. Изучение статического критического поведения магнитных сверхрешеток [6–8] показало, что такой подход наилучшим образом описывает критическое поведения данных моделей.

Таким образом, гамильтониан данной модели может быть представлен в виде модифицированной трехмерной XY-модели:

$$H = -J_\parallel \frac{1}{2} \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \\ - J_\perp \frac{1}{2} \sum_{i,k} (S_i^x S_k^x + S_i^y S_k^y), \quad (5)$$

где первая сумма учитывает прямое обменное взаимодействие каждого магнитного атома с ближайшими соседями внутри слоя, а вторая сумма учитывает РККИ-взаимодействие с атомами соседних слоев через немагнитную прослойку; $S_i^{x,y}$ — проекции спина, локализованного на узле i. При проведении численного эксперимента $R = J_\perp/J_\parallel$ является задаваемым параметром и может изменяться от $R = -1.0$ до $R = 1.0$ [6–8].

Согласно результатам исследования статического критического поведения моделей железо-ванадиевой сверхрешетки Fe_2/V_{13} [6–8], уменьшение параметра R от единицы и ниже приводит к плавному изменению критических индексов. При этом до определенного порога выполняются известные скейлинговые соотношения между критическими индексами (например, соотношение Рашбрука [19]). Однако при $R = 0.01$ происходит достаточно существенное изменение значений критических индексов, которое одновременно сопровождается нарушением скейлинговых соотношений. Это позволяет предположить, что значение $R = 0.01$ является границей перехода от трехмерного магнетизма к квазидвумерному.

Для того чтобы оценить влияние межслойного обменного взаимодействия на характер коротковременной динамики моделей железо-ванадиевых сверхрешеток, нами было выбрано три соотношения обменных взаимодействий: $R = 1.0$, $R = 0.8$ и $R = 0.01$. Отметим, что в случае $R = 1.0$, согласно формуле (5), гамильтониан рассматриваемой модели аналогичен гамильтониану классической трехмерной XY-модели.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Нами с использованием метода коротковременной динамики исследована модель железо-ванадиевой сверхрешетки Fe_2/V_{13} с линейным размером $L = 64$, содержащая 262144 спинов. Вычисления проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло на частицах с периодическими граничными условиями. Релаксация системы осуществлялась из начального низкотемпературного полностью упорядоченного состояния со стартовым значением намагниченности $m_0 = 1$ в течение времени $t_{max} = 1000$, где в качестве единицы «времени» брался один шаг Монте-Карло на спин. Релаксационные зависимости вычислялись до 14000 раз, полученные данные усреднялись между собой.

Критические температуры определялись по зависимости намагниченности от времени (2), которая в точке фазового перехода должна представлять собой прямую линию в двойном логарифмическом масштабе. Отклонение от прямой линии определялось методом наименьших квадратов. За критическую принималась температура, при которой это отклонение было минимальным. При определении T_c анализировались кривые намагниченности с шагом $\Delta T = 0.01$ в единицах обменного интеграла $k_B T/J_{\|}$.

Рисунок 2 демонстрирует зависимость намагниченности от времени при трех значениях температуры в окрестностях точки фазового перехода в двойном логарифмическом масштабе (здесь и далее все величины приведены в условных единицах) для случая $R = 1.0$. Найденное таким образом значение критической температуры в единицах обменного интеграла $k_B T/J_{\|}$ при трех соотношениях обменных взаимодействий R приведено в таблице. Логарифмическая производная в точке фазового перехода вычислялась аппроксимацией методом наименьших квадратов по трем зависимостям намагниченности от времени, построенным при температурах $T_c - 0.01$, T_c и $T_c + 0.01$.

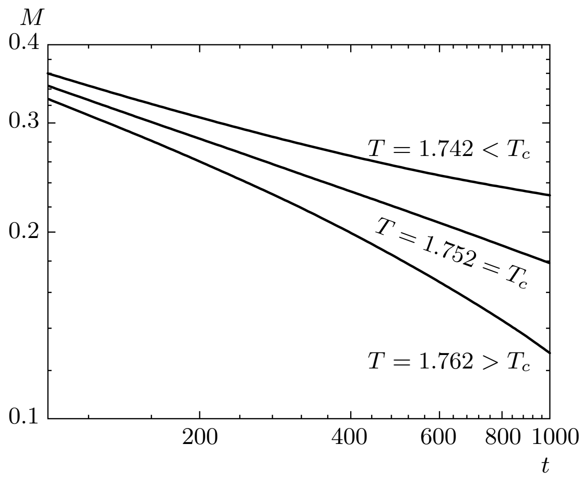

Рис. 2. Зависимость намагниченности от времени при различных значениях температуры, $R = 1.0$

Таблица. Значения критических индексов и критических температур

R	1.0	0.8	0.01
$k_b T_c/J_{\|}$	1.752(1)	1.669(1)	1.044(1)
C_1	0.29(3)	0.27(3)	0.13(3)
C_{l1}	0.79(3)	0.78(3)	0.53(3)
C_U	1.54(3)	1.51(3)	1.20(3)
β	0.36(3)	0.35(3)	0.25(3)
ν	0.65(3)	0.65(3)	0.75(3)
z	1.95(3)	1.99(3)	2.51(3)

На рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе представлена зависимость куммулянта Биндера U_L от времени t при температуре фазового перехода при трех значениях обменного соотношения R. Анализ полученных кривых показал, что степенное скейлинговое поведение $U_L(t)$ реализуется с момента времени порядка $t = 100$. Поэтому итоговая аппроксимация методом наименьших квадратов по формуле (4) проводилась нами в интервале времени $t = [100; 1000]$. Полученные в результате значения индексов C_U и z приведены в таблице.

Как видно на рис. 3, кривые при соотношениях обменных взаимодействий $R = 1.0$ и $R = 0.8$ прак-

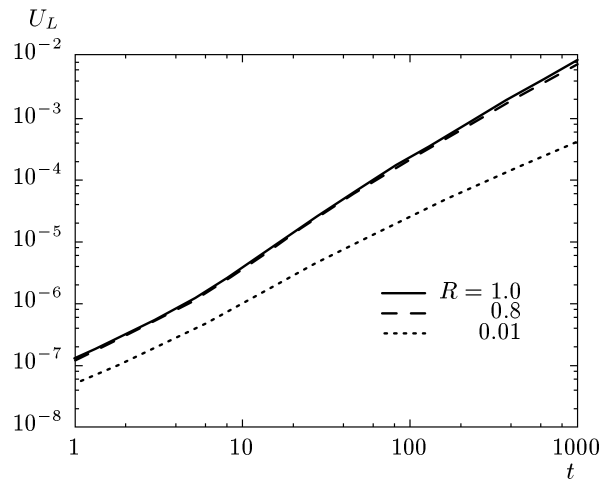

Рис. 3. Зависимость куммулянта Биндера от времени в точке фазового перехода при трех значениях обменного соотношения R

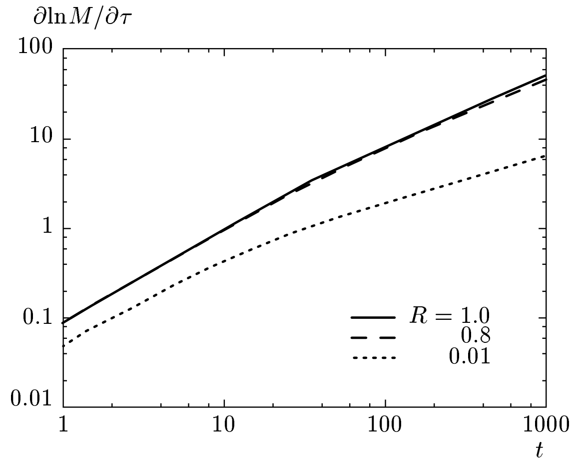

Рис. 5. Зависимость производной намагниченности от времени в точке фазового перехода при трех значениях обменного соотношения R

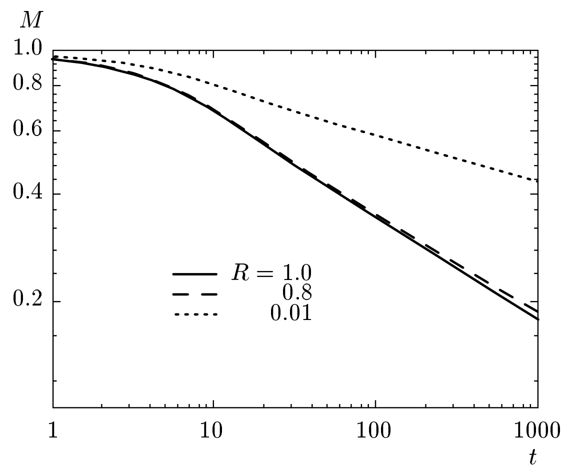

Рис. 4. Зависимость намагниченности от времени в точке фазового перехода при трех значениях обменного соотношения R

тически совпадают между собой и значительно отличаются от случая $R = 0.01$. Аналогичная зависимость наблюдается и в значениях индексов C_U и z. Полученные нами значения индекса z при $R = 1.0$ и $R = 0.8$ близки к теоретически предсказанному значению динамического критического индекса для анизотропных магнетиков ($z = 2$, модель A [17]).

Зависимости намагниченности и производной намагниченности от времени в двойном логарифмическом масштабе при трех значениях обменного соотношения R представлены соответственно на рис. 4 и 5. В результате аппроксимации полученных данных методом наименьших квадратов в интервале времени $t = [100; 1000]$ по формулам (2) и (3) были рассчитаны значения индексов c_l и c_{l1}. Их значения позволили по соотношениям (2)–(4) рассчитать величины статического критического индекса β и статического критического индекса радиуса корреляции ν. Все полученные результаты приведены в таблице. Как и в случае куммулянта Биндера, видны совпадение результатов, полученных при значениях обменного соотношения $R = 1.0$ и $R = 0.8$, и их заметное отличие от результатов для $R = 0.01$.

Отметим, что при соотношении обменных взаимодействий $R = 1.0$ полученные в данной работе величины статических критических индексов близки к теоретически предсказанным значениям $\beta = 0.3485(3)$ и $\nu = 0.67155(37)$ для классической трехмерной XY-модели [20].

Таким образом, полученные нами результаты показали, что незначительное уменьшение обменного соотношения от $R = 1.0$ до $R = 0.8$ не оказывает заметного влияния на характер коротковременной динамики моделей магнитных сверхрешеток Fe_2V_{13}. Сильное уменьшение обменного соотношения до $R = 0.01$, когда, согласно работам [6–8], возможен переход от трехмерного магнетизма к квазидвумерному, приводит к заметному изменению динамического поведения исследованных моделей. При этом наблюдается значительное изменение величин статических критических индексов намагниченности β и радиуса корреляции ν, а также величины динамического критического индекса z.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение 14.B37.21.1092 «Разработка и исследование моделей перспективных наноструктур методами компьютерного моделирования») и РФФИ (гранты №№ 10-02-00130, 12-02-96504-р_юг_а).

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Hjörvarsson, J. A. Dura, P. Isberg et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 901 (1997).

2. V. Leiner, K. Westerholt, A. M. Blixt, H. Zabel, and B. Hjörvarsson, Phys. Rev. Lett. **91**, 37202 (2003).

3. V. Leiner, K. Westerholt, B. Hjörvarsson, and H. Zabel, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, 2377 (2002).

4. C. Rüdt, P. Poulopoulos, J. Lindner et al., Phys. Rev. B **65**, 220404 (2002).

5. M. Pärnaste, M. van Kampen, R. Brucas, and B. Hjörvarsson, Phys. Rev. B **71**, 104426 (2005).

6. K. Sh. Khizriev, A. K. Murtazaev, and V. M. Uzdin, J. Magn. Magn. Mater. **300**, e546 (2006).

7. А. К. Муртазаев, К. Ш. Хизриев, В. М. Уздин, Изв. АН, сер. физ. **70**, 602 (2006).

8. А. К. Муртазаев, УФН **176**, 1119 (2006).

9. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Наука, Москва (1982).

10. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).

11. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).

12. И. К. Камилов, Х. К. Алиев, УФН **168**, 953 (1998).

13. A. Jaster, J. Mainville, L. Schulke et al., arXiv: cond-matt/9808131 v1.

14. B. Zheng, Physica A **283**, 80 (2000).

15. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, B. Zheng et al., Progr. Theor. Phys. **117**, 973 (2007).

16. V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, J. Magn. Magn. Mater. **325**, 122 (2013).

17. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).

18. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmanm, Z. Phys. B **73**, 539 (1989).

19. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* 2-е изд., Наука, Москва (1982).

20. M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto et al., Phys. Rev. B **63**, 214503 (2001).