

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОДЛОЖКИ НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДВУМЕРНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА

С. В. Белим<sup>1,2,a</sup>, И. В. Бычков<sup>3,4,b</sup>, И. В. Мальцев<sup>3,c</sup>

<sup>1</sup> Омский государственный технический университет, Омск, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет, Омск, Россия

<sup>3</sup> Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

<sup>4</sup> Южно-Уральский государственный университет

(национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

<sup>a</sup> sbelim@mail.ru, <sup>b</sup> bychkov@csu.ru, <sup>c</sup> malts\_iv@mail.ru

Исследовано влияние подложки на критическое поведение ферромагнитной моно-слойной плёнки методом компьютерного моделирования. Подложка моделируется как двумерный периодический потенциал. В работе для подложки использовано двумерное обобщение потенциала Френкеля — Конторовой. Для моделирования ферромагнитной плёнки используется модель Изинга. Компьютерное моделирование осуществлено с помощью кластерного алгоритма Вольфа. Получена зависимость температуры Кюри и критических индексов от периода потенциала подложки при различных значениях амплитуды потенциала подложки.

**Ключевые слова:** ферромагнитная плёнка, потенциал Френкеля — Конторовой, фазовый переход, критический индекс.

### Введение

Интерес к тонким ферромагнитным плёнкам обусловлен их широким применением в устройствах спинтроники. В подавляющем большинстве технологических решений тонкая плёнка формируется на немагнитной подложке. Монослойные ферромагнитные плёнки представляют повышенный интерес как перспективные материалы, обладающие новыми физическими свойствами. Однако при формировании таких плёнок на подложке влияние самой подложки становится значительным, так как кристаллическая структура подложки отличается от собственной решётки плёнки. В результате подложка может приводить к изменению геометрической структуры плёнки. Эти изменения могут сказываться на термодинамических и магнитных свойствах плёнки [1]. В частности, в системе наблюдается смещение точки Кюри. Как хорошо известно, температура ферромагнитного фазового перехода определяется значением обменного интеграла материала. Обменный интеграл быстро убывает с увеличением расстояния между атомами. Влияние подложки может приводить к растяжению или сжатию ферромагнитной плёнки, которое изменяет межатомные расстояния. В частности, материалы подложки и ферромагнитной плёнки могут обладать различными коэффициентами теплового расширения. Нагревание системы будет приводить к дополнительным деформациям и смещению

---

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-07-00053, 19-07-00246 и Постановления № 211 Правительства Российской Федерации, договор 02.A03.21.0011.

точки Кюри. Это явление получило название фазового перехода, индуцированного подложкой.

Экспериментально такие фазовые переходы наблюдались для тонких плёнок  $MnAs$  на немагнитной подложке [2–4]. В этих экспериментах подложка обладает кристаллической решёткой, отличной от плёнки, и задаёт ограничения на размер плёнки, создавая дополнительные механические напряжения. В статье [5] экспериментально показано, что деформация растяжения ферромагнитной плёнки  $MnAs$ , составляющая 0.5 %, приводит к смещению точки Кюри на 50 К.

Влияние подложки на ферромагнитные плёнки даёт возможность управлять намагниченностью с помощью электрического поля. Для этого ферромагнитная плёнка напыляется на сегнетоэлектрическую подложку. Изменение кристаллической решётки подложки в электрическом поле приводит к смещению точки Кюри в ферромагнитной плёнке, что сказывается на величине её намагниченности. Возможность управлять намагниченностью плёнки играет важную роль при создании устройств спинтроники. Появляется возможность управления ферромагнитным порядком при комнатных температурах. Управление намагниченностью с помощью электрического поля позволяет снизить энергопотребление устройств спинтроники.

В последнее время структуры, состоящие из ферромагнитной плёнки на сегнетоэлектрической подложке, активно исследуются экспериментально и на основе моделирования из первых принципов. В работе [6] изучается тонкая плёнка магнитного оксида на сегнетоэлектрической подложке. Показано, что магнитные свойства плёнки сильно зависят от состояния подложки. Регулируя параметры сегнетоэлектрика, авторы демонстрируют фазовый переход из ферромагнитной в парамагнитную фазу. Авторы работы [7] исследуют систему, состоящую из тонкой ферромагнитной плёнки  $Li_{1-x}Sr_xMnO_3$  ( $x = 0.5$  и  $0.3$ ), нанесённой на сегнетоэлектрическую подложку  $BaTiO_3$ . В этой системе изменение намагниченности происходит во внешнем электрическом поле и сопровождается деформациями системы. Ферромагнитная плёнка  $BiFeO_3$ , нанесённая на подложку  $LaAlO_3$ , исследована в статье [8]. Деформации плёнки вызваны управляемым фазовым переходом в подложке. В результате изменяется намагниченность и коэрцитивная сила плёнки. В работе [9] исследованы тонкие плёнки  $LaCoO_3$  и  $LaCo_{0.7}Ni_{0.3}O_3$  на монокристаллической подложке  $LaAlO_3$ , нанесённые методом импульсного лазерного осаждения. Управление состоянием подложки позволяет повышать намагниченность плёнок и сохранять их ферромагнитное состояние вплоть до комнатных температур. В статье [9] проведён эксперимент по управлению намагниченностью тонких плёнок  $\alpha-Fe_{50}Mn_{50}$ , выращенных на  $GaAs$  с помощью деформаций растяжения. Деформации вызваны различием в тепловом расширении плёнки и подложки.

Таким образом, различные ферромагнитные плёнки на немагнитной подложке демонстрируют изменение своего магнитного поведения при различии параметров кристаллической решётки. Однако все исследования сосредоточены на конкретных материалах. Общий же подход к описанию подобных явлений является недостаточно разработанным. В данной статье исследовано влияние подложки на температуру фазового перехода и значения критических индексов двумерной ферромагнитной плёнки.

## 1. Описание системы

При компьютерном моделировании в качестве тонкой плёнки будем использовать двумерную модель Изинга с квадратной решёткой, период которой равен  $a_0$ . Для потенциальной энергии взаимодействия атомов плёнки будем использовать

гармоническое приближение, предполагая, что деформации решётки будут малы по сравнению с её периодом:

$$U_{\text{int}} = \frac{g}{2} \sum ((x_{n+1} - x_n - a_0)^2 + (y_{n+1} - y_n - a_0)^2).$$

Здесь  $g$  — коэффициент жёсткости,  $a_0$  — межатомное расстояние без влияния подложки,  $(x_n, y_n)$  — положение  $n$ -го атома плёнки.

Влияние подложки будем описывать с помощью двумерного периодического потенциала Френкеля — Конторовой [10] с периодом  $b$ :

$$U_{\text{sub}} = \frac{A}{2} \sum \left( 2 - \cos \left( \frac{2\pi x_n}{b} \right) - \cos \left( \frac{2\pi y_n}{b} \right) \right),$$

где  $A$  — амплитуда потенциала,  $b$  — период подложки.

Общая потенциальная энергия системы будет вычисляться как сумма энергий упругих деформаций плёнки и потенциальной энергии подложки:  $U = U_{\text{int}} + U_{\text{sub}}$ .

Если период невозмущённой решётки спинов совпадает с периодом подложки, то атомы размещаются в минимумах потенциала и деформации решётки не происходит. Температура Кюри и критические индексы системы остаются неизменными. При несовпадающих периодах происходит деформация решётки. В дальнейшем ограничимся ситуацией, когда периоды различаются, что встречается не чаще, чем в 10 % случаев. Деформация решётки приводит к изменению расстояния между атомами. В результате изменяется обменный интеграл взаимодействия спинов атомов. Запишем Гамильтониан двумерной модели Изинга

$$H = \sum_{i,j,k,l=0}^{L-1} J(i, j, k, l) S_{ij} S_{kl},$$

где  $S_{i,j}$  — значение спина атома, расположенного в узле с координатами  $(x_i, y_j)$ ,  $L$  — линейный размер системы. Суммирование выполняется только по ближайшим соседям. Как уже было сказано выше, мы ограничиваемся только небольшими отклонениями от положения атомов в недеформированной решётке, поэтому для изменения обменного интеграла может быть использовано линейное приближение

$$J(i, j, k, l) = J_0 - B(((x_i - x_k)^2 + (y_j - y_l)^2)^{1/2} - a_0).$$

Здесь  $J_0$  — обменный интеграл взаимодействия спинов исходной недеформированной плёнки. Коэффициент  $B$  показывает скорость убывания обменного интеграла с расстоянием.

Компьютерное моделирование будем проводить с помощью кластерного алгоритма Вольфа [11]. В качестве параметра порядка была использована намагниченность плёнки

$$m = \left( \sum_{i,j=0}^{L-1} S_{ij} \right) / L^2.$$

Температура фазового перехода  $T_c$  определялась как точка пересечения куммулянтов Биндера четвёртого порядка [12] для систем с различным линейным размером:

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}.$$

Угловые скобки использованы для обозначения термодинамического усреднения по состояниям системы. Температура Кюри  $T_c$  вычислялась в единицах обменного интеграла недеформированной плёнки  $J_0$ .

Для вычисления магнитной восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [13]  $\chi = NK (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$ , где  $K = |J_0|/(k_B T)$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Восприимчивость в критической области удовлетворяет соотношению  $\chi \sim L^{-\gamma/\nu}$ . Из данного соотношения может быть найдено отношение критических индексов  $\gamma/\nu$ . Критический индекс  $\nu$  может быть вычислен из соотношения

$$\frac{dU}{dT} \sim L^{-1/\nu}.$$

Остальные критические индексы определяются из скейлинговых соотношений

$$\eta = 2 - \gamma/\nu, \quad \beta = \frac{\nu}{2}(D - 2 + \eta), \quad \alpha = 2 - D\nu,$$

где  $D$  — размерность системы, в нашем случае  $D = 2$ .

Для исследования фазового перехода в плёнке предварительно исследовалось смещение её атомов, вносимое влиянием подложки. Положение атомов определяется основным состоянием кристаллической решётки плёнки в потенциальном поле подложки. Для определения основного состояния осуществлялся поиск минимума потенциальной энергии системы:  $U = U_{\text{int}} + U_{\text{sub}} \rightarrow \min$ .

Минимизация потенциальной энергии осуществлялась методом Монте-Карло. В качестве начального состояния выбиралось невозмущённое состояние плёнки. Далее осуществлялся последовательный проход по решётке с попыткой сдвинуть каждый атом на случайный вектор, длина которого не превышает  $0.01a_0$ . Если новое положение атома приводило к понижению потенциальной энергии системы, то оно оставлялось, в обратном случае отбрасывалось. Остановка итерационного процесса происходила тогда, когда очередной проход по всем атомам не изменял их положения.

В случае различия в периодах невозмущённой плёнки и подложки ( $a_0 \neq b$ ) важным является вопрос граничных условий. В рассматриваемом случае он осложняется тем, что необходимо согласовывать алгоритм поиска основного состояния с последующим применением алгоритма Вольфа. Если крайние атомы закреплены на границе подложки, то остальные атомы размещаются в минимумах потенциальной энергии подложки [14–18]. Происходит линейное увеличение или уменьшение элементарной кристаллической решётки. При этом критическая температура также изменяется линейно, пропорционально изменению размеров плёнки. Критические индексы остаются неизменными. Этот случай легко описывается без использования компьютерного моделирования.

Интерес представляют системы со свободными концами [17; 18]. Для обеспечения свободных краёв в двумерной системе производилась фиксация положения одного атома в центре системы с координатами  $(x_0 = L/2, y_0 = L/2)$ . Положение подложки выбиралось таким образом, чтобы этот атом располагался в минимуме потенциала. Положение остальных атомов в основном состоянии определялось из условия минимума потенциальной энергии.

## 2. Компьютерный эксперимент

При постановке компьютерного эксперимента было выбрано значение  $J_0 = 1$ . В этом случае температура  $T$  и скорость убывания обменного интеграла с расстоянием  $B$  измеряются в относительных единицах, пропорциональных  $J_0$ . Также

было выбрано значение  $B = 1$ . Данный параметр влияет на угол наклона кривой зависимостей критической температуры. Увеличение или уменьшение значения  $B$  приводит к пропорциональному изменению угла наклона, не влияя на общий вид зависимости. Для периода недеформированной кристаллической решётки плёнки использовалось значение  $a_0 = 1$ , так как оно является характерным масштабом системы. Остальные геометрические параметры системы измеряются в единицах  $a_0$ . По аналогичным причинам использовалось значение  $g = 1$ . Компьютерный эксперимент проводился с двумя относительными значениями амплитуды подложки  $A = 0.01$  и  $A = 0.1$ . Период потенциала подложки принимал значения от  $b = 0.9$  до  $b = 1.1$  с шагом  $\Delta b = 0.01$ . Размер системы изменялся от  $L = 20$  до  $L = 50$  с шагом  $\Delta L = 10$ .

На рис. 1 представлена зависимость температуры фазового перехода в плёнке  $T_c$  от периода потенциала подложки  $b$  при двух значениях амплитуды потенциала  $A = 0.01$  и  $A = 0.1$ .

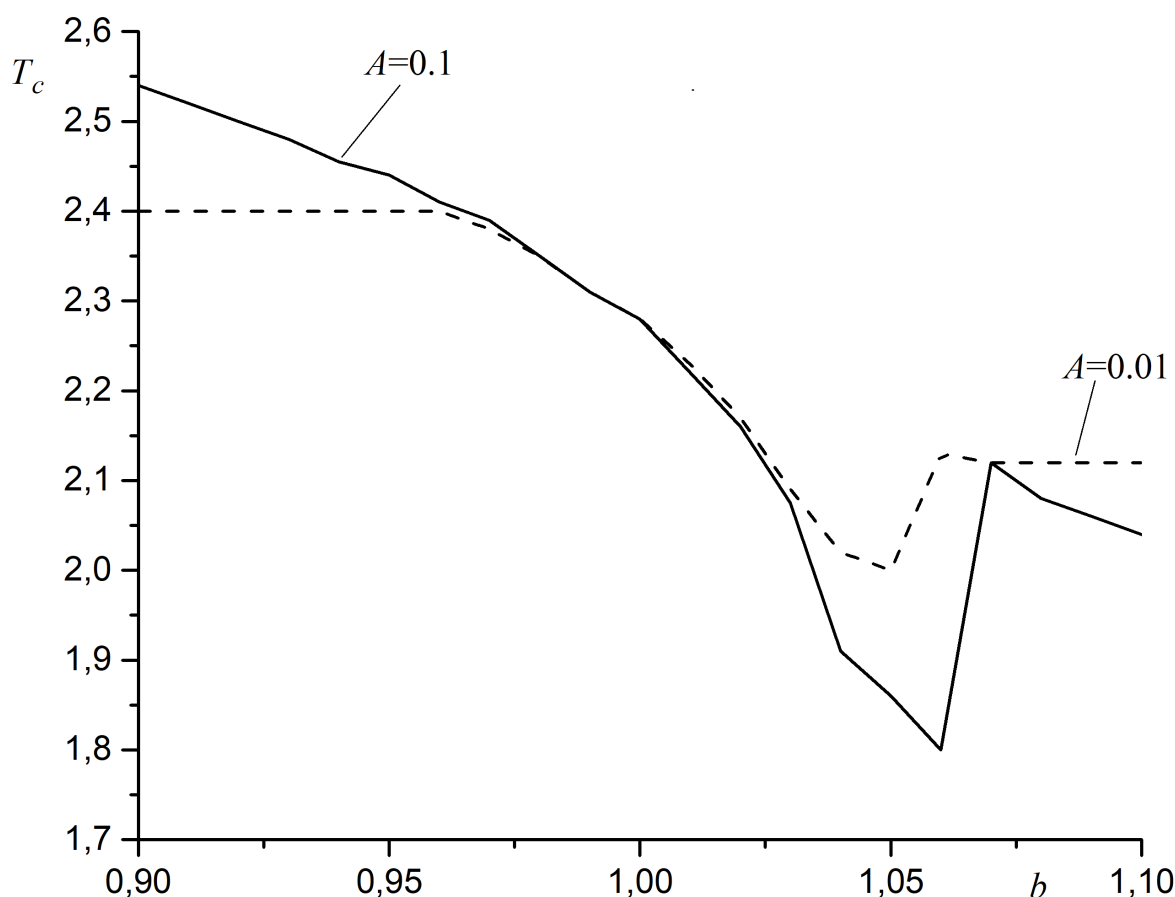


Рис. 1. Зависимость температуры фазового перехода в плёнке  $T_c$  от периода потенциала подложки  $b$  при двух значениях амплитуды потенциала подложки (сплошная линия —  $A = 0.1$ , пунктирная линия —  $A = 0.01$ )

Как и следовало ожидать, оба параметра подложки (амплитуда и период) оказывают влияние на фазовый переход в ферромагнитной плёнке. При уменьшении периода подложки ( $b < 1$ ) происходит сжатие кристаллической решётки плёнки. Вследствие этого уменьшается расстояние между спинами и увеличивается значение обменного интеграла, которое приводит к росту температуры Кюри. Однако упругие силы взаимодействия между атомами препятствуют сжатию, в итоге атомы находятся не строго в минимумах потенциала подложки, поэтому изменение температуры фазового перехода носит нелинейный характер. Из рис. 1 видно, что чем выше амплитуда потенциала подложки, тем кривая температуры Кюри ближе

к прямой. При низком потенциале подложки для деформаций сжатия, превышающих 5 %, температура фазового перехода выходит на постоянное значение. Упругие силы кристаллической решётки препятствуют дальнейшему сжатию. Аналогичная картина наблюдается и при малых деформациях растяжения. Если деформации не превышают 5 %, то происходит простое растяжение решётки, сопровождающееся уменьшением температуры Кюри. Как и в случае сжатия, коэффициент деформации зависит от амплитуды потенциала подложки. Однако, в отличие от сжатия, при растяжении, превышающем некоторое критическое значение  $b_c$  ( $b > b_c$ ), происходит резкий скачок температуры фазового перехода с дальнейшим её плавным уменьшением. Для  $A = 0.1$  критическое растяжение  $b_c = 1.06$ , для  $A = 0.01$  —  $b = 1.05$ . Как показал анализ конфигурации размещения атомов, при значениях  $b > b_c$  происходит перестройка кристаллической решётки плёнки. То есть в системе наблюдается структурный фазовый переход. Точка  $b = b_c$  является тройной, в ней происходит пересечение линии структурного фазового перехода с линией ферромагнитного фазового перехода. Причём изменение кристаллической решётки происходит скачкообразно, откуда можно сделать вывод, что фазовый переход относится к первому роду. Изменение геометрии системы также подтверждается графиком зависимости отношения критических индексов  $\gamma/\nu$ , приведённым на рис. 2.

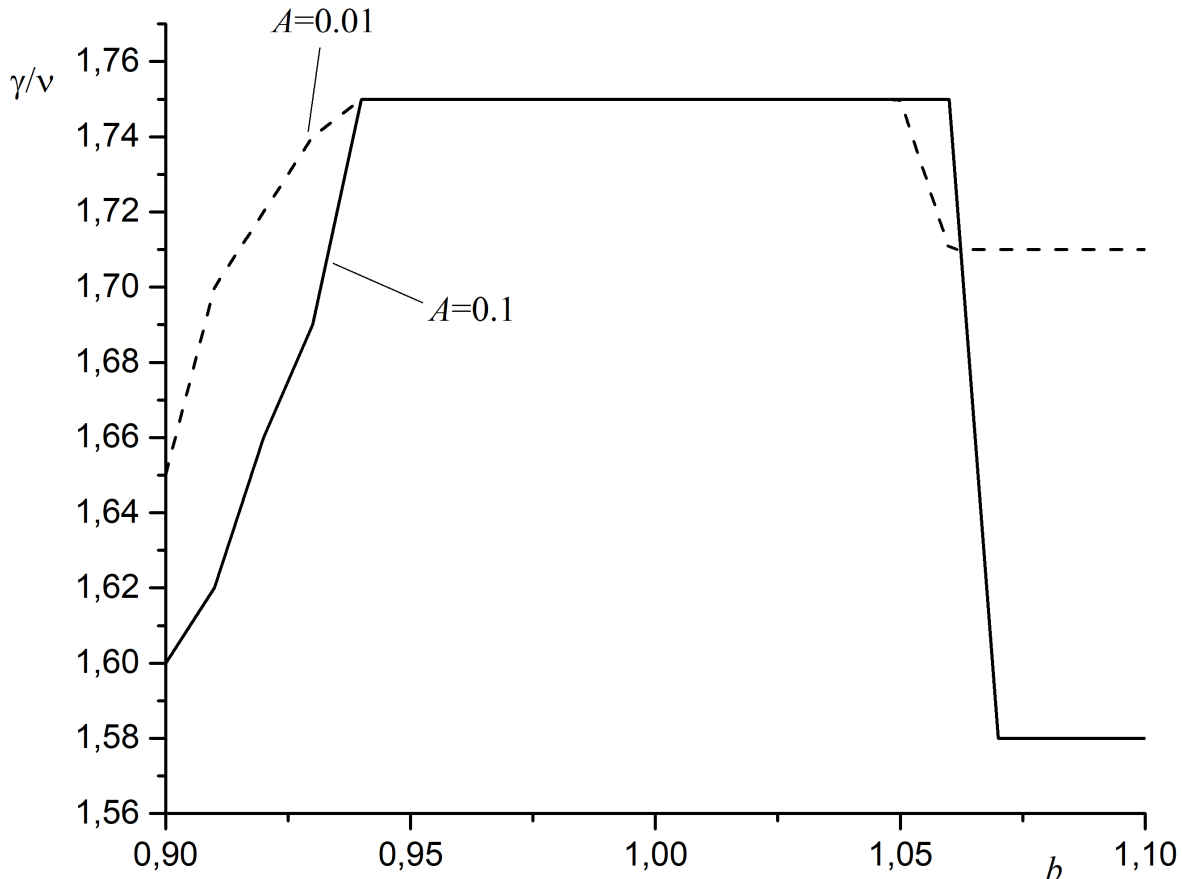


Рис. 2. Зависимость отношения критических индексов  $\gamma/\nu$  от периода потенциала подложки  $b$  при различных значениях амплитуды потенциала  $A$  (сплошная линия —  $A = 0.1$ , пунктирная линия —  $A = 0.01$ )

Для отношения критических индексов наблюдается ступенчатое изменение при  $b > b_c$ . Происходит перестройка системы, которая переводит её в новый класс универсальности критического поведения. Однако из графика изменения отношения критических индексов также видно, что изменение класса универсальности также происходит при  $b < 0.95$ . Однако изменение не сопровождается скачкообразным изменением критической температуры и плавным изменением критических индек-

сов. Отсюда можно сделать вывод, что при деформации сжатия, превышающей 5 %, также происходит структурный фазовый переход. Однако этот переход относится ко второму роду и происходит в виде непрерывного изменения кристаллической решётки.

## Заключение

Компьютерное моделирование показало, что изменение состояния подложки приводит к деформации кристаллической решётки плёнки, изменяющей её магнитное поведение. При малых деформациях плёнки, вызванных влиянием подложки, происходит простое увеличение элементарной ячейки, что приводит к линейному изменению температуры Кюри. Критические индексы системы остаются неизменными. Практически все экспериментальные работы исследуют именно этот режим. Так, в статье [19] исследуются ферромагнитные плёнки NiO на ориентированной сегнетоэлектрической монокристаллической подложке. Показано, что изменение температуры системы на 50 К приводит к изменению намагниченности на 15 %. В работе [20] проведено исследование ферромагнитной плёнки  $\text{LaCoO}_{3-\delta}$  на различных подложках, обеспечивающих её деформацию (от 1.4 % сжатия до 2.5 % растяжения). Показано, что при растяжении плёнки она переходит в ферромагнитное состояние при температуре 80–85 К, что не совпадает с точкой Кюри для недеформированной плёнки. В статье [21] исследованы управляемые деформации в тонких плёнках  $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$  на подложках  $\text{La}_{0.18}\text{Sr}_{0.82}$  и  $\text{SrTiO}_3$ . Деформации вызваны несоответствием решёток плёнки и подложки. Плёнка, осаждённая на  $\text{SrTiO}_3$ , демонстрирует деформации растяжения 1.3 %, что приводит к понижению температуры Кюри до 240 К. Снижение температуры фазового перехода наблюдается также на подложке  $\text{La}_{0.18}\text{Sr}_{0.82}$ , вызывающей неизотропные деформации. В статье [22] исследованы магнитные свойства плёнок магнетита  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , выращенных на подложках  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ,  $\text{MgGa}_2\text{O}_4$  и  $\text{CoGa}_2\text{O}_4$  с различной степенью рассогласования решёток (3.8 %, –1.4 % и –0.8 % соответственно). Подложки индуцируют механические напряжения в плёнке, что приводит к значительному изменению её магнитных свойств. Деформационный обратный магнетоэлектрический эффект в гетероструктуре, состоящей из ферромагнитной плёнки  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  на монокристаллической подложке  $\text{BaTiO}_3$ , исследован в работах [23; 24]. Связь плёнки с подложкой приводит к прерывистым изменениям намагниченности во внешнем электрическом поле. При электрическом поле 8 кВ/см сдвиг коэрцитивной силы составляет 55 %. В статье [25] продемонстрировано изменение намагниченности насыщения ультратонких ферромагнитных плёнок Pd в гетероструктурах Pd/SrTiO<sub>3</sub>/BaTiO<sub>3</sub>, исследованное экспериментально и на основе расчётов из первых принципов. При структурных фазовых переходах в подложке BaTiO<sub>3</sub> намагниченность Pd уменьшается примерно на 5 % вследствие деформационного эффекта. Расчёты из первых принципов дают значения 3–4 %.

Как показали исследования, проведённые в этой работе, если периоды решётки плёнки и подложки отличаются более чем на 5 %, то существенно меняется характер поведения намагниченности плёнки. Это связано с перестройкой кристаллической решётки плёнки. Происходит структурный фазовый переход и изменяется класс универсальности, к которому относится ферромагнитная плёнка. Это изменение сказывается как на температуре Кюри, так и на критических индексах. Точка, на фазовой диаграмме, соответствующая деформации 5 %, по-видимому, является тройной точкой пересечения ферромагнитного и структурного фазовых переходов в тонкой плёнке.

## Список литературы

1. **Белим С. В., Бычков И. В., Кузьмин Д. А., Шавров В. Г.** Исследование фазового перехода в двумерной структурированной наносистеме // Челябин. физ.-мат. журн. 2020. Т. 5, вып. 4, ч. 1. С. 463–470.
2. **Kim J., Akinaga H., Kim J.** Observation of magnetic domain structures in epitaxial MnAs film on GaAs(001) with temperature hysteresis // Applied Physics Letters. 2011. Vol. 98, no. 10. P. 102511.
3. **Paes V. Z. C., Graff I. L., Varalda J., Etgens V. H.** The role of magnetoelastic and magnetostrictive energies in the magnetization process of MnAs/GaAs epilayers // Journal of Physics: Condensed Matter. 2013. Vol. 25, no. 4. P. 046003.
4. **Fu X., Warot-Fonrose B., Arras R., Seine G., Demaille D., Eddrief M., Etgens V., Serin V.** *In situ* observation of ferromagnetic order breaking in MnAs/GaAs(001) and magnetocrystalline anisotropy of  $\alpha$ -MnAs by electron magnetic chiral dichroism // Physical Review B. 2016. Vol. 93, no. 10. P. 104410.
5. **Garcia V., Sidis Y., Marangolo M., Vidal F., Eddrief M., Bourges P., Maccherozzi F., Ott F., Panaccione G., Etgens V.** Biaxial strain in the hexagonal plane of MnAs thin films: The key to stabilize ferromagnetism to higher temperature // Physical Review Letters. 2007. Vol. 99, no. 11. P. 117205.
6. **Udalov O. G., Beloborodov I. S.** Tuning the magnetic state in a phase-separated magnetic oxide thin film by means of electric field and temperature // Physical Review B. 2020. Vol. 101, no. 17. P. 174433.
7. **Schmitz M., Weber A., Petravic O., Waschke M., Zakalek P., Mattauch S., Koutsioubas A., Bruckel T.** Strain and electric field control of magnetism in  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  thin films on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrates // New Journal of Physics. 2020. Vol. 22, no. 5. P. 053018.
8. **Wang L., Li Z., Wang C., Gong X., Wang C.** Phase transition-induced modulation of exchange bias in Fe/BiFeO<sub>3</sub> bilayers // Science of Advanced Materials. 2020. Vol. 12, no. 5. P. 701–706.
9. **Kumar A., Kumar V., Shukla D., Kumar R., Choudhary R. J., Kumar R.** Structural, electronic, transport and magnetic studies of  $\text{LaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$  ( $x = 0, 0.3$ ) thin films // Journal of Applied Physics. 2019. Vol. 126, no. 23. P. 235103.
10. **Frenkel J., Kontorova T.** On the theory of plastic deformation and twinning // Academy of Sciences of the USSR. Journal of Physics. 1939. Vol. 1. P. 137–149.
11. **Wolff U.** Collective Monte Carlo updating for spin systems // Physical Review Letters. 1989. Vol. 62. P. 361–364.
12. **Binder K.** Critical properties from Monte-Carlo coarse-graining and renormalization // Physical Review Letters. 1981. Vol. 47. P. 693–696.
13. **Landau D. P., Binder K.** Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet // Physical Review B. 1978. Vol. 17. P. 2328–2342.
14. **Aubry S., LeDaeron P. Y.** The discrete Frenkel — Kontorova model and its extensions: I. Exact results for the ground-states // Physica D. 1983. Vol. 8, no. 3. P. 381–422.
15. **Chou W., Griffiths R. B.** Ground states of one-dimensional systems using effective potentials // Physica D. 1986. Vol. 34, no. 9. P. 6219.
16. **Hupalo M., Schmalian J., Tringides M. C.** "Devil's staircase" in Pb/Si(111) Ordered Phases // Physical Review Letters. 2003. Vol. 90, no. 21. P. 216106.
17. **Babushkin A. Y., Abkaryan A. K., Dobronets B. S., Krasikov V. S., Filonov A. N.** The ground state of the Frenkel — Kontorova model // Physics of the Solid State. 2016. Vol. 58, no. 9. P. 1834–1845.
18. **Abkaryan A. K., Babushkin A. Y., Dobronets B. S., Krasikov V. S., Filonov A. N.** Ground state of a periodic elastic atomic chain in an arbitrary periodic potential // Physics of the Solid State. 2016. Vol. 58, no. 2. P. 346–350.



19. **Yan M. Y., Yan J. M., Zhang M. Y., Chen T. W., Gao G. Y., Wang F. F., Chai Y., Zheng R. K.** Nonvolatile manipulation of electronic and ferromagnetic properties of NiO-Ni epitaxial film by ferroelectric polarization charge // *Applied Physics Letters*. 2020. Vol. 117, no. 23. P. 232901.
20. **Chaturvedi V., Walter J., Paul A., Grutter A., Kirby B., Jeong J. S., Zhou H., Zhang Z., Yu B., Greven M., Mkhoyan K. A., Birol T., Leighton C.** Strain-induced majority carrier inversion in ferromagnetic epitaxial  $\text{LaCoO}_{3-\delta}$  thin films // *Physical Review Materials*. 2020. Vol. 4, no. 3. P. 034403.
21. **Liu Y., Ma T., Qiao K., Li J., Xiao A., Wang J., Hu F., Shen B.** Strain control of phase transition and magnetocaloric effect in  $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$  thin films // *Applied Physics Letters*. 2020. Vol. 116, no. 8. P. 082402.
22. **Singh A. V., Srivastava A., Mohammadi J. B., Regmi S., Bhat U., Datta R., Mewes T., Gupta A.** Studies of electrical and magnetic properties across the Verwey transition in epitaxial magnetite thin films // *Journal of Applied Physics*. 2019. Vol. 126, no. 9. P. 093902.
23. **Panchal G., Phase D. M., Reddy V. R., Choudhary R. J.** Strain-induced elastically controlled magnetic anisotropy switching in epitaxial  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  thin films on  $\text{BaTiO}_3(001)$  // *Physical Review B*. 2018. Vol. 98, no. 4. P. 045417.
24. **Panchal G., Choudhar R. J., Phase D. M.** Magnetic properties of  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  film on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrate // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2018. Vol. 448. P. 262–265.
25. **Ban Y., Komatsu K., Sakuragi S., Taniyama T., Kageshima H., Sato T.** Change in magnetization of ferromagnetic Pd(001) ultrathin films induced by the strain effect of  $\text{BaTiO}_3$  // *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 112, no. 14. P. 142409.

*Поступила в редакцию 09.03.2021.*

*После переработки 10.05.2021.*

#### Сведения об авторах

**Белим Сергей Викторович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры «Физика», Омский государственный технический университет; профессор кафедры прикладной информатики, Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет, Омск, Россия; e-mail: sbelim@mail.ru.

**Бычков Игорь Валерьевич**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет; научный сотрудник лаборатории функциональных материалов, Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия; e-mail: bychkov@csu.ru.

**Мальцев Иван Валерьевич**, лаборант-исследователь кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия; e-mail: malts\_iv@mail.ru.

**STUDY OF THE SUBSTRATE INFLUENCE ON THE CRITICAL BEHAVIOR OF A TWO-DIMENSIONAL FERROMAGNET****S.V. Belim<sup>1,2,a</sup>, I.V. Bychkov<sup>3,4,b</sup>, I.V. Maltsev<sup>3,c</sup>**<sup>1</sup>*Omsk State Technical University, Omsk, Russia*<sup>2</sup>*Siberian State Automobile and Highway University, Omsk, Russia*<sup>3</sup>*Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia*<sup>4</sup>*Laboratory of functional materials, South Ural State University, Chelyabinsk, Russia*<sup>a</sup>*sbelim@mail.ru*, <sup>b</sup>*bychkov@csu.ru*, <sup>c</sup>*malts\_iv@mail.ru*

We investigate the substrate influence on the critical behavior of a magnetic monolayer film by the computer simulation method. The substrate performs as a two-dimensional periodic potential. We used a two-dimensional generalization of the Frenkel – Kontorova potential for the substrate. The Ising model is used to simulate a ferromagnetic film. Monte Carlo simulation was carried out using the Wolf cluster algorithm. We obtain the dependence of Curie temperature and critical exponents of the substrate potential period for different values of the substrate potential amplitude.

**Keywords:** *ferromagnetic film, Frenkel – Kontorova potential, phase transition, critical exponent.*

**References**

1. **Belim S.V., Bychkov I.V., Kuzmin D.A., Shavrov V.G.** Phase transition study in two-dimensional structured nanosystem. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2020, vol. 5, no. 4, part 1, pp. 463–470.
2. **Kim J., Akinaga H., Kim J.** Observation of magnetic domain structures in epitaxial MnAs film on GaAs(001) with temperature hysteresis. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, no. 10, p. 102511.
3. **Paes V.Z.C., Graff I.L., Valada J., Etgens V.H.** The role of magnetoelastic and magnetostrictive energies in the magnetization process of MnAs/GaAs epilayers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, vol. 25, no. 4, p. 046003.
4. **Fu X., Warot-Fonrose B., Arras R., Seine G., Demaille D., Eddrief M., Etgens V., Serin V.** *In situ* observation of ferromagnetic order breaking in MnAs/GaAs(001) and magnetocrystalline anisotropy of  $\alpha$ -MnAs by electron magnetic chiral dichroism. *Physical Review B*, 2016, vol. 93, no. 10, p. 104410.
5. **Garcia V., Sidis Y., Marangolo M., Vidal F., Eddrief M., Bourges P., Maccherozzi F., Ott F., Panaccione G., Etgens V.** Biaxial strain in the hexagonal plane of MnAs thin films: The key to stabilize ferromagnetism to higher temperature. *Physical Review Letters*, 2007, vol. 99, no. 11, p. 117205.
6. **Udalov O.G., Beloborodov I.S.** Tuning the magnetic state in a phase-separated magnetic oxide thin film by means of electric field and temperature. *Physical Review B*, 2020, vol. 101, no. 17, p. 174433.
7. **Schmitz M., Weber A., Petravic O., Waschke M., Zakalek P., Mattauch S., Koutsioubas A., Bruckel T.** Strain and electric field control of magnetism in  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  thin films on ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  substrates. *New Journal of Physics*, 2020, vol. 22, no. 5, p. 053018.

The research was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research in the framework of scientific projects 20-07-00053, 19-07-00246 and of Act 211 of Government of the Russian Federation, contract 02.A03.21.0011.

8. **Wang L., Li Z., Wang C., Gong X., Wang C.** Phase transition-induced modulation of exchange bias in Fe/BiFeO<sub>3</sub> bilayers. *Science of Advanced Materials*, 2020, vol. 12, no. 5, pp. 701–706.
9. **Kumar A., Kumar V., Shukla D., Kumar R., Choudhary R.J., Kumar R.** Structural, electronic, transport and magnetic studies of LaCo<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $x = 0, 0.3$ ) thin films. *Journal of Applied Physics*, 2019, vol. 126, no. 23, p. 235103.
10. **Frenkel J., Kontorova T.** On the theory of plastic deformation and twinning. *Academy of Sciences of the USSR. Journal of Physics*, 1939, vol. 1, pp. 137–149.
11. **Wolff U.** Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, 1989, vol. 62, p. 361–364.
12. **Binder K.** Critical properties from Monte-Carlo coarse-graining and renormalization. *Physical Review Letters*, 1981, vol. 47, pp. 693–696.
13. **Landau D.P., Binder K.** Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet. *Physical Review B*, 1978, vol. 17, pp. 2328–2342.
14. **Aubry S., LeDaeron P.Y.** The discrete Frenkel — Kontorova model and its extensions: I. Exact results for the ground-states. *Physica D*, 1983, vol. 8, no. 3, pp. 381–422.
15. **Chou W., Griffiths R.B.** Ground states of one-dimensional systems using effective potentials. *Physica D*, 1986, vol. 34, no. 9, p. 6219.
16. **Hupalo M., Schmalian J., Tringides M.C.** "Devil's staircase" in Pb/Si(111) ordered phases. *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, no. 21, p. 216106.
17. **Babushkin A.Y., Abkaryan A.K., Dobronets B.S., Krasikov V.S., Filonov A.N.** The ground state of the Frenkel — Kontorova model. *Physics of the Solid State*, 2016, vol. 58, no. 9, pp. 1834–1845.
18. **Abkaryan A.K., Babushkin A.Y., Dobronets B.S., Krasikov V.S., Filonov A.N.** Ground state of a periodic elastic atomic chain in an arbitrary periodic potential. *Physics of the Solid State*, 2016, vol. 58, no. 2, pp. 346–350.
19. **Yan M.Y., Yan J.M., Zhang M.Y., Chen T.W., Gao G.Y., Wang F.F., Chai Y., Zheng R.K.** Nonvolatile manipulation of electronic and ferromagnetic properties of NiO-Ni epitaxial film by ferroelectric polarization charge. *Applied Physics Letters*, 2020, vol. 117, no. 23, p. 232901.
20. **Chaturvedi V., Walter J., Paul A., Grutter A., Kirby B., Jeong J.S., Zhou H., Zhang Z., Yu B., Greven M., Mkhoyan K.A., Birol T., Leighton C.** Strain-induced majority carrier inversion in ferromagnetic epitaxial LaCoO<sub>3- $\delta$</sub>  thin films. *Physical Review Materials*, 2020, vol. 4, no. 3, p. 034403.
21. **Liu Y., Ma T., Qiao K., Li J., Xiao A., Wang J., Hu F., Shen B.** Strain control of phase transition and magnetocaloric effect in Nd<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub> thin films. *Applied Physics Letters*, 2020, vol. 116, no. 8, p. 082402.
22. **Singh A.V., Srivastava A., Mohammadi J.B., Regmi S., Bhat U., Datta R., Mewes T., Gupta A.** Studies of electrical and magnetic properties across the Verwey transition in epitaxial magnetite thin films. *Journal of Applied Physics*, 2019, vol. 126, no. 9, p. 093902.
23. **Panchal G., Phase D.M., Reddy V.R., Choudhary R.J.** Strain-induced elastically controlled magnetic anisotropy switching in epitaxial La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> thin films on BaTiO<sub>3</sub>(001). *Physical Review B*, 2018, vol. 98, no. 4, p. 045417.
24. **Panchal G., Choudhar R.J., Phase D.M.** Magnetic properties of La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> film on ferroelectric BaTiO<sub>3</sub> substrate. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2018, vol. 448, pp. 262–265.
25. **Ban Y., Komatsu K., Sakuragi S., Taniyama T., Kageshima H., Sato T.** Change in magnetization of ferromagnetic Pd(001) ultrathin films induced by the strain effect of BaTiO<sub>3</sub>. *Applied Physics Letters*, 2018, vol. 112, no. 14, p. 142409.

Accepted article received 09.03.2021.

Corrections received 10.05.2021.