

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Физический факультет

На правах рукописи

Шарафуллин Ильдус Фанисович

**Фазовые переходы и критические явления  
в магнитоэлектрических сверхрешетках:  
Теория и моделирование**

Специальность 01.04.02 — «теоретическая физика»

Диссертация на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук

Научный консультант:  
д.ф.-м.н. Харрасов М.Х.

Москва - 2021

## Оглавление

### Оглавление

<b>Введение .....</b>	<b>5</b>
Общая характеристика работы .....	5
Актуальность темы исследования .....	5
Степень разработанности темы исследования .....	7
Цели и задачи диссертационной работы .....	17
Научная новизна .....	18
Методология и методы исследования .....	20
Положения, выносимые на защиту .....	21
Объем и структура диссертации .....	25
<b>Глава 1. Динамические взаимодействия в сегнетомагнитных кристаллах во внешних электрическом и магнитном полях.....</b>	<b>31</b>
§ 1. Феноменологический гамильтониан антиферромагнитной подсистемы .....	32
§ 2. Гамильтониан сегнетоэлектрической подсистемы .....	40
§ 3. Динамическое и кинематическое взаимодействие спиновых волн в антиферромагнетике во внешнем магнитном поле .....	44
§ 4. Свободная энергия газа магнонов .....	56
§ 5. Затухание спиновых волн за счет магнон-магнонного взаимодействия .....	66
§ 6. Выводы к главе.....	77
<b>Глава 2. Магнитоэлектрическое взаимодействие в сверхрешетках. Моделирование фазовых переходов методами Монте-Карло.....</b>	<b>78</b>

§1. Введение .....	78
§ 2. Модель и основное состояние .....	80
§3. Моделирование методом Монте - Карло.....	86
3.1. $S - S - P$ - модель магнитоэлектрического взаимодействия .....	91
§ 4. $P - P - S$ -модель магнитоэлектрического взаимодействия.....	98
§ 5. Исследование температурных зависимостей намагниченности.....	104
и поляризации в приближении теории среднего поля .....	104
§ 6. Выводы к главе.....	112
<b>Глава 3. Киральное магнитоэлектрическое взаимодействие в магнито-</b>	
<b>сегнетоэлектрических сверхрешетках: скирмионы .....</b>	<b>113</b>
§ 1. Введение .....	113
§ 2. Модель и основное состояние .....	114
2.1. Модель.....	114
2.2. Основное состояние .....	119
2.2.1. Основное состояние в отсутствии внешнего магнитного поля....	119
2.2.2. Основное состояние во внешнем магнитном поле .....	126
§ 3. Фазовые переходы в сверхрешетках и устойчивость основного скирмионного состояния.....	132
§ 4. Выводы к главе.....	148
<b>Глава 4. Элементарные возбуждения в сверхрешетке в отсутствии</b>	
<b>внешнего магнитного поля .....</b>	<b>149</b>
§ 1. Введение .....	149
§ 2. Модель сверхрешетки с магнитной анизотропией.....	150
§ 3. Случай сверхрешетки с однослойной магнитной .....	154
и сегнетоэлектрической пленкой.....	154

§ 4. Сверхрешетка из двуслойной магнитной и сегнетоэлектрической пленки.....	163
§ 5. Выводы к главе.....	167
<b>Глава 5. Скирмионные кристаллы и фазовые переходы в фрустрированной сверхрешетке ферромагнетик / сегнетоэлектрик.</b>	
<b>Киральное магнитоэлектрическое взаимодействие в фрустрированной <math>J1 - J2</math> модели .....</b>	<b>168</b>
§ 1. Введение .....	168
§ 2. Гамильтониан фрустрированной $J1 - J2$ модели. ....	169
Скирмионный кристалл .....	169
§ 3. Фазовые переходы в скирмионном фрустрированном кристалле.....	190
§ 4. Выводы к главе.....	198
<b>Заключение.....</b>	<b>200</b>
<b>Список литературы .....</b>	<b>203</b>

# **Введение**

## **Общая характеристика работы**

### **Актуальность темы исследования**

Исследование систем взаимодействующих многих частиц является важной задачей теоретической физики. Одно из актуальных направлений статистической механики связано с изучением физических свойств кристаллических структур, в которых, наряду с трансляционной инвариантностью, существуют иные типы дальнего порядка, обусловленные по терминологии Н.Н. Боголюбова [1, 2] вырождением состояния термодинамического равновесия.

В последние годы высокий интерес научного сообщества связан с исследованием материалов, в которых одновременно в определенном интервале температур существует дальний порядок магнитного и электрического дипольного типов.

Это обусловлено, прежде всего, тем, что кристаллические структуры, в которых одновременно сосуществуют магнитное и сегнетоэлектрическое упорядочение, являются перспективными материалами для создания наноструктурных элементов в приборах и устройствах, используемых в нанoeлектронике, спинтронике и устройствах памяти, записи и обработки информации. Возросший интерес к исследованиям магнитоэлектрических свойств, поверхностных эффектов, фазовых переходов и критических явлений в сегнетомагнитных материалах (часто называемых в научной литературе мультиферроиками) и сверхрешетках - многослойных магнитных нанопленках - вызван тем, что они обладают рядом уникальных свойств с широкой областью применения. В этих системах одновременное нарушение пространственной и временной инверсии приводит к возникновению в сегнетомагнетиках магнитоэлектрического эффекта. При этом появляется возможность эффективно управ-

лять магнитными характеристиками системы с помощью внешних электрических полей и, наоборот, электрическими свойствами с помощью внешних магнитных полей.

Исследованию физических свойств сегнетомагнитных материалов посвящено значительное количество экспериментальных и теоретических работ.

В то же время задача практического использования этих материалов в различных сферах науки и техники, включая технику физического эксперимента, требует детального изучения обнаруженных эффектов, как, например, явления гигантского магнитоакустического резонанса. Несомненный интерес представляет построение микроскопической теории сегнетомагнитных кристаллов. В этом случае существенным становится выбор исходной модели – гамильтониана системы.

Один из возможных способов состоит в выборе гамильтониана общего вида с парным взаимодействием, обладающим градиентной инвариантностью первого рода, в котором нарушение указанной симметрии вводится аналогично идее Н.Н. Боголюбова при построении теории сверхпроводимости на основе аппроксимирующего гамильтониана [3].

Мы полагаем, что при построении статистической модели сегнетомагнетика, основываясь на трансляционной симметрии системы, ее можно рассматривать как решеточную систему с необходимо заданными периодическими граничными условиями.

Для неколлинеарных структур микроскопический механизм связи поляризации и относительной ориентации векторов намагниченности может быть описано киральным взаимодействием типа Дзялошинского-Мория [4]. В магнитоупорядоченных средах взаимодействие Дзялошинского-Мория ответственно за формирование в тонких магнитоэлектрических пленках стабильных вихревых спиновых конфигураций - скирмионов. В настоящее время скирмионы рассматриваются как основные элементы для создания нового поколения сверхбыстрой и плотной магнитной памяти. В то же время обнаружено, что они демонстрируют сильно нелинейный динамический отклик на

внешние воздействия. Это делает их перспективными новыми материалами для создания логических устройств.

Есть предположение, что наиболее обширным классом кандидатов на обнаружение скирмионов являются поверхности и интерфейсы магнитных материалов, где сама геометрия образца нарушает центральную симметрию, и, следовательно, может привести к появлению киральных взаимодействий, подобных взаимодействию Дзялошинского-Мория.

Актуальность и новизна этих исследований обусловлена тем, что в настоящее время управление магнитными нанообъектами (магнитными вихрями, скирмионами и др.) осуществляется способами, которые будучи энергозатратными, являются неэффективными. Это является существенным препятствием для создания новых устройств спинтроники на базе магнитных наносистем. В этой связи, исследование новых подходов к управлению магнитными объектами без использования спин-поляризованных токов являются крайне актуальными.

Важнейшая на сегодняшний день задача состоит в выяснении того, как характер взаимодействия в системе зависит от ее структуры на микро и наномасштабе и наоборот, как дальнодействующие взаимодействия влияют на структуру системы. Имея ответы на эти вопросы, можно использовать наноструктурирование, изменение масштабных или материальных параметров системы для управления коллективным поведением нано и микросистем, что позволит синтезировать материалы с новыми свойствами.

### **Степень разработанности темы исследования**

В начале 1970-х годов физика магнитоэлектрических явлений стремительно развивалась, был обнаружен линейный магнитоэлектрический эффект в  $Cr_2O_3$  [5] и был открыт целый ряд сегнетомагнитных перовскитов [6-15]. После некоторого угасания интереса к этим явлениям, бурное развитие физики

магнитоэлектрических явлений вновь началось в начале 2000-х годов, о чем свидетельствует несколько сот ежегодных публикаций, посвященных магнитоэлектрикам.

Теоретическое исследование и расчет свойств наноразмерных систем мультислоев и сверхрешеток мультиферроиков с несколькими конкурирующими обменными взаимодействиями в общем случае затруднены вследствие дальнедействующего характера принимаемых во внимание взаимодействий. Тем не менее, в некоторых частных случаях наноразмерных решеток мультиферроиков удается рассчитать возможные основные состояния системы [16], и установить, что в зависимости от геометрии решетки основное состояние может быть ферромагнитным, антиферромагнитным или микровихревым. В частности, возможные метастабильные состояния в таких решетках были исследованы в работе [17].

Неоднородные спиновые структуры стали предметом пристального внимания после обнаружения в них наведенного вектора сегнетоэлектрического дипольного момента [18-25]. Возникновение поляризации возможно вследствие неоднородного магнитоэлектрического эффекта, а именно вектор сегнетоэлектрического дипольного момента может индуцироваться в области магнитной неоднородности. Известно, что вектор электрической поляризации преобразуется так же, как комбинация вектора намагниченности и градиента вектора намагниченности, что означает, что они могут быть связаны соотношением пропорциональности [26]. В работе [27] было показано, что в кристалле с кубической симметрией связь между электрической поляризацией и неоднородным распределением вектора намагниченности имеет следующий вид

$$\vec{P} = \gamma \cdot \chi_e (\vec{M}(\nabla \cdot \vec{M}) - (\vec{M} \cdot \nabla)\vec{M}), \quad (1)$$

где  $\gamma$  магнитоэлектрический коэффициент,  $\chi_e$  — диэлектрическая проницаемость.

Микроскопический механизм взаимодействия между электрическим дипольным моментом направлением векторов намагниченностей основан на взаимодействии Дзялошинского-Мории [28-30].

Соответствующее слагаемое в гамильтониане описывается членами вида:

$$H_{DM} = \vec{D}_{i,j} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1}, \quad (2)$$

где  $\vec{S}_i$  - спин  $i$ -го магнитного иона, а  $\vec{D}_{i,j}$  - вектор Дзялошинского-Мории. Вектор  $\vec{D}_{i,j}$  пропорционален векторному произведению  $\vec{R} \times \vec{r}_{i,j}$  вектора  $\vec{R}$ , который определяет смещение лиганда и вектора  $|\vec{r}_{i,j}| = 1$ , направленного вдоль оси, связывающей магнитные ионы на узлах  $i$  и  $j$  (см. рис. 1а).

$$\mathbf{D}_{i,j} \propto \mathbf{R} \times \mathbf{r}_{i,j} \quad (3)$$

Таким образом, взаимодействие Дзялошинского-Мории характеризует взаимосвязь угла между спинами на соседних узлах и величины смещения немагнитных ионов. В некоторых микромагнитных структурах все лиганды сдвинуты в одном направлении, что приводит к появлению макроскопических электрических диполей (см. рис. 1б). По своей природе, взаимодействие Дзялошинского-Мории является релятивистской поправкой к косвенному обменному взаимодействию и является относительно небольшим [31]. В случае магнитоупорядоченных сред, вклад взаимодействия Дзялошинского-Мории в свободную энергию может быть представлен в виде антисимметричных инвариантов Лифшица, которые содержат пространственные производные вектора намагниченности. Возникающие вихревые магнитные конфигурации могут быть стабилизированы механизмом Скирма [32].

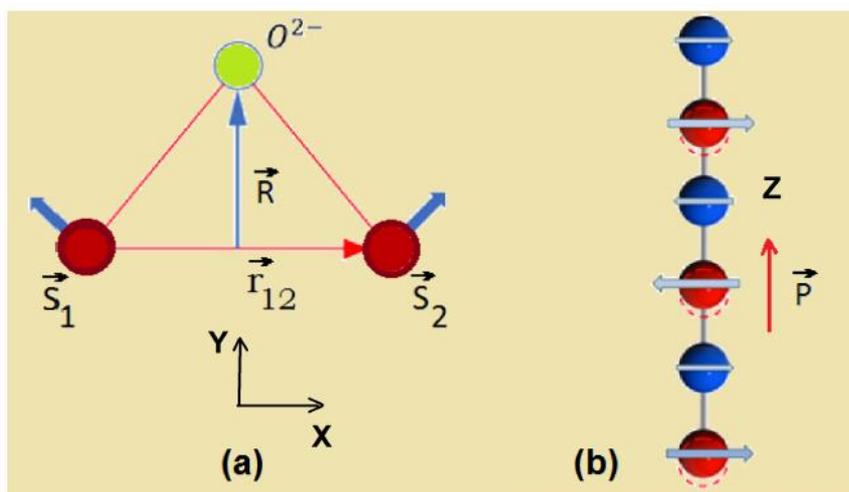


Рис. 1: а) Иллюстрация взаимодействия Дзялошинского- Мория. Спины находятся в  $xy$  – плоскости; (b) микроскопические механизмы возникновения спонтанной электрической поляризации  $\vec{P}$  за счет смещения атомов (красный цвет) в том же направлении оси  $z$ .

Скирмионы в качестве стабильных микромагнитных структур были теоретически предсказаны в работе [33]. По аналогии вводится представление для элементарных частиц как вихревых конфигурации непрерывных полей. Стабильность таких вихревых конфигурации основывается на «механизме Скирма» - компонентах Лагранжиана, содержащих антисимметричные комбинации пространственных производных компонент поля. Долгое время скирмионам были посвящены только теоретические исследования. В частности, например, было показано, что такие структуры могут возникать в антиферромагнетиках [34] и в магнитных металлах [35], причем в работе [35] модель включает в себя возможность изменения величины амплитуды вектора намагниченности и спонтанного возникновения решетки со скирмионной структурой без воздействия внешнего магнитного поля. Необходимым условием для существования скирмионов в объемных образцах было отсутствие обратного преобразования в кристаллической магнитной группе симметрии. Диеп и соавт. [36] исследовали скирмионный кристалл, который образуется на

двумерной квадратной решетке, вследствие возникновения конкуренции ферромагнитного обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория между взаимодействующими ближайшими соседями, находящимися во внешнем магнитном поле. Было показано, что формируется двумерный 2D скирмионный кристалл, он имеет гексагональную структуру, которая является стабильной до температуры  $T_c$ , а затем при повышении температуры происходит переход в парамагнитную фазу и динамика скирмионов при  $T < T_c$  следует растянутому экспоненциальному закону. Кроме того, в работах [37- 39] показано, что скирмионы представляют собой двумерные солитоны, стабильность которых обеспечивается короткодействующими взаимодействиями и взаимодействием Дзялошинского-Мория. Устойчивость скирмионов, а также низкий энергетический барьер для дискретного изменения состояния позволяет использовать скирмионы в качестве энергоэффективных битов информации (наличие или отсутствие скирмиона в определенной области функционального элемента сопоставляется с информационным логическим битом). Математическое моделирование создания и транспорта скирмионов с использованием спин-поляризованного тока в тонких пленках было проведено в работе [40]. Преимущество скирмионов по отношению к таким топологическим объектам как например доменные границы в устройствах и схемах магнитной памяти (например, “racetrack memory” см. [40]) определяется более низкой величиной токов, необходимых для перемещения скирмионов по трэку. Скирмионы были экспериментально обнаружены, созданы и могут быть управляемыми в ряде кристаллических систем, в том числе магнитных материалах и сверхрешетках [41-60], мультиферроиках [61], сегнетоэлектриках [62], и полупроводниках [63]. Скирмионы были недавно обнаружены в проводящих и изолированных гелиомагнетиках под воздействием магнитного поля [64, 65]. Эксперименты показали, что под воздействием приложенного магнитного поля, геликоидная структура преобразуется в скирмионный кристалл с треугольной магнитной сверхрешеткой [66]. Дальнейший рост напряженности внешнего магнитного поля приводит к тому, что геликоидная спиновая конфигурация

трансформируется в скирмионную решетку с треугольной структурой. В сильном магнитном поле спиновое упорядочение переходит в ферромагнитную фазу, в которой скирмионы существуют как устойчивые топологические дефекты [67-70].

Аналогичные экспериментальные результаты были получены для соединения  $Fe_{1-x}Co_xSi$ ,  $x = 0.2$  [71]. Исследование  $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$  позволило сделать следующий важный шаг - непосредственное наблюдение скирмионов с помощью электронной микроскопии Лоренца [72]. Зависимость устойчивости скирмионной решетки от толщины пленки  $FeGe$  подробно исследовалась в [73]. Исследования показали, что область стабильности скирмионов в фазовой диаграмме тем шире, чем меньше толщина пленки.

Таким образом, можно сказать, что скирмионы, как самые компактные на сегодняшний день изолированные микромагнитные объекты представляют наибольший практический интерес как элементы памяти [74-90]. Стабильность скирмионов и скирмионных кристаллических структур позволяет надеяться на разработку энергонезависимых устройств записи информации, а низкие управляющие токи уменьшат стоимость перезаписи по сравнению с аналогичными технологиями, основанными на доменных границах.

В работах [91-93] изучались магнитные и электрические свойства скирмионной решетки, возникающей при определенных условиях в мультиферроике  $Cu_2OSeO_3$ . Было показано, для управления микромагнитными структурами – скирмионами можно использовать также и внешнее электрическое поле, которое посредством магнитоэлектрического эффекта воздействует на магнитные скирмионы, тем самым существенно минимизирует энергозатраты на управление скирмионами. Стоит отметить, что мультиферроик  $BaFe_{12-x-0.05}Sc_xMg_{0.05}O_{19}$  также может иметь скирмионную структуру [94, 95]. Эффективное управление движением и процессами зарождения и затухания скирмионов были впервые продемонстрированы в двухатомном слое  $PdFe$  на иридиевой подложке, и важность такого открытия для технологии

хранения информации трудно переоценить: этот эффект открывает перспективы и возможности записи и считывания отдельных скирмионов с использованием спин-поляризованного туннельного тока [96]. В работе [97] также было показана возможность зарождения скирмионов электрическим полем с помощью неоднородного магнитоэлектрического эффекта.

Тематика многих работ последних лет в данной области сфокусирована на исследовании скирмионов, индуцированных на поверхностях и интерфейсах сверхрешеток. Структура сверхрешеток естественным образом приводит к взаимодействию скирмионов на разных интерфейсах [98-110]. Интерфейсы сред, отличающихся природой своего упорядочения, формируют уникальную динамику взаимодействия по сравнению с взаимодействием скирмионов в средах с одним и тем же интерфейсом. В работе [111], было проведено теоретическое исследование двух скирмионов на двухслойных системах с использованием микромагнитного моделирования, а также анализа, основанного на уравнении Тилиа. Установлены особенности скирмионного взаимодействия, а именно столкновения и образования связанного состояния. Динамика такого процесса весьма чувствительна по отношению к знаку взаимодействия Дзялошинского-Мории, то есть к спиральности и топологическому заряду двух скирмионов. Динамика такого процесса хорошо описывается уравнением Тилиа. Кроме того, обнаружен колоссальный эффект переноса спинового тока, связанного со скирмионной парой на двухслойных системах с антиферромагнитной связью. В работе [112] исследование уравнения Тилиа проводилось для индуцированного спинового тока в скирмионной решетке с помощью двух разрешимых моделей потенциала пиннинга.

В реальных магнитных структурах дальний порядок возникает как результат довольно сложных конкурирующих взаимодействий. Существует большой класс так называемых фрустрированных систем, в которых ключевую роль играет конкуренция между различными типами взаимодействий. К ним относятся такие системы, как тяжелые металлы лантаноидов (гольмий, тербий и диспрозий) [113,115], геликоиды MnSi [116]. Скирмионы проявляют

весьма необычные физические свойства в фрустрированных магнитных средах [117, 118-130]. Мультиферроики и сверхрешетки мультиферроиков (например, *PZT / LSMO* и *BTO / LSMO*) привлекают все больший интерес исследователей в связи с наличием фрустраций и конкуренции различного рода взаимодействий, которая проявляется в сосуществовании и взаимосвязи сегнетоэлектрического и магнитного упорядочения.

Сверхрешетки и гетероструктуры типа магнетик/сегнетоэлектрик привлекают большое внимание в качестве магнитоэлектрических (МЕ) материалов [131-150], с большим откликом магнитоэлектрического эффекта на интерфейсе между магнитной и сегнетоэлектрической поверхностью, по сравнению с массивными магнитоэлектрическими кристаллами [151-160]. В них ярко проявляются собственные магнитоэлектрические эффекты, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием [161, 162].

Янссен и др. [163,164] предложили модель взаимодействия между сегнетоэлектрической и ферромагнитной частью магнитоэлектрических сверхрешеток, но с помощью этой модели им удалось описать динамику и конфигурацию доменных стенок лишь для одномерного случая. В работе Ли и др. [165] реализован алгоритм на основе метода Монте-Карло для двумерной (2D) решетки с учетом коллинеарного магнитоэлектрического взаимодействия, параметры ферромагнитного и сегнетоэлектрического упорядочения, а также взаимодействие между ними учитывалось в каждом узле решетки.

Усиление магнитоэлектрического эффекта может происходить за счет сдвига фазовых переходов в магнитной и сегнетоэлектрических подсистемах, что было показано в работе [166]. Предложено несколько моделей возникновения магнитоэлектрического эффекта в различных мультиферроичных материалах. Среди них, следует отметить модель нескомпенсированных пар [167], геометрическое возникновение сегнетоэлектрической поляризации в гексагональных манганитах [168], поляризация, наведенная спиральной спиновой конфигурацией [169], поляризация, наведенная по причине сдвига спинов в

фрустрированных магнетиках со сложной комбинацией конкурирующих взаимодействий между магнитными параметрами порядка [170]. В работе [171] было показано, что в геометрически фрустрированных магнитных нанопленках фрустрации могут генерировать различные конкурирующие фазовые состояния, что в свою очередь приводит к возникновению магнитоэлектрического взаимодействия.

Возможность экспериментального наблюдения изолированного скирмиона, а также скирмионной решетки была предложена с использованием стандартной структуры с двумя подрешетками, в которой каждая подрешетка образует скирмионный кристалл (например, гексагональную решетку), с антиферромагнитным взаимодействием между подрешетками [172].

В работе [173] была предложена комбинация двумерной модели Гейзенберга и взаимодействия Дзялошинского-Мории (ДМ) для исследования времени жизни и устойчивости антиферромагнитного скирмиона в зависимости от температурных флуктуации и внешнего магнитного поля. Ядав и др. [174] экспериментально наблюдали сложные топологии электрических поляризации, а именно вихревые и антивихревые структуры нанометрового размера, аналогичные магнитным скирмионам, которые были обнаружены ранее, например, в магнитных нанопленках [175-185]. Авторы широко цитируемой работы [186] экспериментально показали, что вихри поляризации образуются благодаря возникновению конкуренции между зарядовыми, орбитальными и решеточными степенями свободы в сверхрешетках, образованных из чередующихся слоев титаната свинца и титаната стронция. Фазо-полевое моделирование подтверждает, что вихревой массив является энергетически выгодным состоянием для исследуемой периодической сверхрешетки.

В работе [187] авторы исследовали скирмионы и антискирмионы в двумерной фрустрированной ферромагнитной пленке с конкурирующими обменными взаимодействиями. За основу была взята классическая  $J_1 - J_2$  модель Гейзенберга на простой квадратной решетке с диполь-дипольным взаимодействием. Последним зачастую пренебрегали в многочисленных предыдущих

работах по изучению двумерных фрустрированных ферромагнитных пленок [188, 189]. Авторы доказали, что диполь-дипольное взаимодействие играет существенную роль в физике фрустрированных скирмионов.

Лин и соавт. [190] изучали динамику скирмионов в хиральных магнитах в присутствии спин-поляризованного тока. Они показали, что скирмионы могут быть созданы из магнитной спирали в хиральных магнитных пленках путем увеличения спин-поляризованного тока. В работе [191] выполнено численное моделирование уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта, результаты которого продемонстрировали удивительно устойчивое и универсальное соотношение спиновый ток/скорость движения скирмионов, вызванное вращающим моментом спинового тока. Это соотношение не зависит от примесей и неадиабатических эффектов, что резко контрастирует со случаем доменной стенки или спиновой спирали.

Описание и построение корректных моделей процессов транспортировки скирмионов является очень актуальной задачей с точки зрения практических приложений. Поэтому попытки построить модели взаимодействия скирмионов на интерфейсах различных сред между различными связанными интерфейсами предпринимаются у разных исследовательских групп [192-215].

## Цели и задачи диссертационной работы

Основной целью диссертационной работы является разработка и исследование моделей магнитоэлектрического взаимодействия, а также влияния внешних полей и фрустраций для управляющего воздействия на топологические магнитные вихри и скирмионы на интерфейсах сверхрешеток мультиферроиков.

В диссертации решаются следующие основные задачи.

1. Исследование магнитоэлектрического взаимодействия под влиянием внешнего магнитного, электрического полей в магнитных системах с орторомбической кристаллической структурой во внешних постоянных магнитном и электрическом полях.

2. Определение вклада в свободную энергию спиновой подсистемы, связанного с динамическими взаимодействиями спиновых волн, изучение зависимости от температуры и внешних полей энергетического спектра, намагниченности, теплоемкости орторомбического двухподрешеточного антиферромагнетика.

3. Исследование фазовых переходов и критических явлений, магнитных свойств (кривых намагничивания, магнитных состояний и переходов между ними) в наноразмерных сверхрешетках мультиферроиков с различными моделями магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе магнитных и сегнетоэлектрических пленок.

4. Исследование элементарных возбуждений в системе и влияния магнитоэлектрической связи на спектр спиновых волн в пленках мультиферроиков.

5. Исследование спиновой конфигурации основного состояния поверхностных слоев магнитной пленки с конкурирующими обменным, магнитоэлектрическим взаимодействиями и постоянным внешним магнитным полем, действующим перпендикулярно плоскости пленок.

6. Исследовать возможность стабилизации магнитных топологически заряженных состояний – скирмионов, а также статических и динамических свойств магнитных скирмионов на интерфейсе и внутренних слоях в магнитных пленках при воздействии внешних полей.

7. Исследовать фазовые переходы в различных слоях сверхрешетки с конкурирующими обменным, магнитоэлектрическим взаимодействиями и постоянным внешним магнитным и электрическим полем, направленным перпендикулярно плоскости пленок при различной температуре.

8. Проанализировать влияние фрустрации в магнитной и сегнетоэлектрической пленках при наличии магнитоэлектрического взаимодействия на магнитоэлектрической границе сверхрешетки на формирование скирмионной кристаллической структуры и ее устойчивость к температурным флуктуациям и внешним управляющим воздействиям.

9. Установить зависимость между условиями устойчивости скирмионов и интенсивностями управляющих воздействий.

### **Научная новизна**

Научная новизна работы определяется оригинальностью полученных результатов, подтверждается публикациями в ведущих физических научных журналах и заключается в следующем:

1. Теоретически исследованы эффекты магнитоэлектрического взаимодействия в сверхрешетках мультиферроиков, показано, что учет диполь-дипольного и магнитоэлектрического взаимодействия приводит к тому, что тип фазового перехода при увеличении величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия может меняться. Этот эффект сопровождается изменением температуры перехода как в магнитной, так и в сегнетоэлектрической пленках. При определенных значениях магнитоэлектрического взаимодействия и управляющих полей эти температуры совпадают для обеих подсистем и могут как увеличиваться, так и уменьшаться. Построены фазовые диаграммы, подтверждающие тесную взаимосвязь магнитных и сегнетоэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу и отличающиеся значениями температур переходов внутри пленок и на поверхностных слоях

2. В работе впервые показана возможность стабилизации трехмерных магнитных скирмионов, не только на поверхности границы магнитной и сегнетоэлектрической пленок, но и во внутренних слоях магнитной подсистемы. Стабилизация обусловлена балансом энергии обменного взаимодействия, энергии магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля в наноразмерной сверхрешетке. При этом скирмионы стабильны в широком температурном и полевом диапазоне значений.

3. Проведено всестороннее исследование магнитных, сегнетоэлектрических фазовых переходов фрустрированной наноразмерной сверхрешетки мультиферроика. Впервые обнаружено формирование в системе фрустрированных решеток стабильных в широком диапазоне полей и температур магнитных скирмионов блоховского типа как на поверхностном слое, так и внутри магнитной пленки.

4. Предложены новые модели магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе сверхрешеток мультиферроиков и исследованы их свойства при учете действия магнитного и электрического поля. Модель кирального магнитоэлектрического взаимодействия в системе приводит к новым, не наблюдавшимся ранее эффектам коллективного поведения и самоорганизации

в системе, обусловленным балансом взаимодействий между спинами и поляризациями.

**Практическая ценность** полученных в диссертации результатов заключается в том, что

1. Развитые в работе представления о влиянии магнитоэлектрического взаимодействия на свойства ансамблей магнитных наночастиц могут служить основой при разработке устройств магнитной памяти нового поколения с высокой плотностью записи, обладающих высокой энергетической эффективностью.

2. Предложенные механизмы стабилизации магнитных скирмионов в сверхрешетках ферромагнетик / сегнетоэлектрик могут быть использованы для создания систем с высокой плотностью топологического заряда в широком температурном диапазоне.

3. Обнаруженные эффекты позволяют выработать оптимальный баланс между чувствительностью скирмионов к управляющим воздействиям и их устойчивости к температурным флуктуациям - соблюдение этого баланса необходимо для успешной реализации скирмионов в качестве носителей информации.

Результаты автора используются в дальнейших исследованиях другими учеными как в нашей стране, так и за рубежом, что подтверждается публикациями в высокорейтинговых журналах, их цитированием и многочисленными приглашенными докладами на международных научных конференциях и рабочих совещаниях.

### **Методология и методы исследования**

В работе использовались квантово-механический и феноменологический подходы для расчета энергетических спектров и параметров порядка (метод функций Грина, теория среднего поля). Методы температурных функций

Грина и теории приближенного вторичного квантования, разработанные академиком Н.Н. Боголюбовым [1-3], широко используются в теоретической физике, имеют строгое математическое обоснование и обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными данными; построение диаграмм для магнитной подсистемы с сильным магнитоэлектрическим взаимодействием базируется на общепринятой теории возмущений для взаимодействующих частиц; полученные зависимости намагниченности в сегнетомагнетиках от температуры качественно совпадают с экспериментальными результатами; при расчетах спектров упругих волн использован симметричный подход, расчеты проводились на кристаллах, обладающих тетрагональной симметрией кристаллической решетки.

Компьютерные методы Монте-Карло для математического моделирования фазовых переходов и критических явлений являются общепринятыми и повсеместно используются в компьютерной физике, а результаты Монте-Карло моделирования фазовых переходов в объемных структурах согласуются с экспериментальными данными.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Магнитные скирмионы стабильны в сверхрешетках и нанопленках ферромагнетик/сегнетоэлектрик при условии действия кирального магнитоэлектрического взаимодействия вида Дзялошинского-Мория на границе пленок и воздействия внешнего магнитного поля перпендикулярно плоскости слоев.

2. В основном состоянии в наноструктурированных многослойных магнитных пленках ферромагнетик/сегнетоэлектрик формируется скирмионная кристаллическая структура под воздействием фрустрации, магнитоэлектрического взаимодействия и приложенного внешнего магнитного поля в большой области значений параметров фрустрации.

3. Фрустрация в ферромагнитной пленке способствует возникновению решетки магнитных скирмионов, при этом достаточно сильные фрустрации в сегнетоэлектрической подсистеме, напротив, дестабилизируют скирмионную структуру, даже при наличии слабых фрустраций в магнитной системе.

4. Решетка магнитных скирмионов стабильна до достаточно высоких значений температур фазового перехода  $T_C$ . Магнитная фрустрация способствует возникновению скирмионов и при этом значительно снижает температуру перехода.

5. Существование достаточно стабильных скирмионов, ограниченных магнито-сегнетоэлектрическим интерфейсом при конечной  $T$  зависит от соотношения толщины пленки и периода структуры, обусловлено балансом энергии конкурирующих взаимодействий.

6. Характер фазового перехода меняется при увеличении значения параметра магнитоэлектрического взаимодействия. Построены фазовые диаграммы, которые показывают тесную взаимосвязь магнитных и сегнетоэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу и отличающиеся значениями температур переходов внутри пленок и на поверхностных слоях.

7. Определены зависимости эффективных параметров магнитоэлектрического взаимодействия, спектра связанных магнитоэлектрических волн в орторомбических антисегнетоантиферромагнетиках от приложенного внешнего магнитного и электрического поля.

8. В диаграммном представлении ряда теории возмущений определены: вклад в свободную энергию, затухание магнонов, определяемое процессами слияния и распада магнонов друг с другом.

9. Спектр элементарных возбуждений в сверхрешетке, состоящей из атомарной магнитной пленки, находящейся между ферроэлектрическими пленками, имеет линейную зависимость от волнового вектора в длинноволновом пределе при больших величинах межфазной связи на интерфейсе. При  $k \rightarrow 0$  другая мода спектра имеет параболический вид, а магнитоэлектрическое взаимодействие оказывает сильное влияние на спектр спиновых волн магнитной пленки.

10. Квантовые флуктуации, конкурируя с температурными, вызывают кроссовер намагниченности при различных значениях параметра магнитоэлектрического взаимодействия. Большие величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия приводят к сильному сокращению спиновой длины в области низких температур.

### **Степень достоверности и апробация работы**

Все основные результаты работы обсуждались на семинарах физико-технического института и на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», часть результатов обсуждалась на семинарах в Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation LPTM CNRS UMR 8089, CY Cergy Paris Université, France (Университет Сержи-Париж, Франция). Материалы диссертационной работы были представлены на 26 российских и международных научных конференциях, в том числе: Euro-Asian symposium “Trends in magnetism” EASTMAG-2010 (Екатеринбург), 2016

(Красноярск), 2019 (Екатеринбург); XXI Международная конференция «Новое в магнитных материалах и магнетизме», Москва, 2009, XXII Международная конференция «Новое в магнитных материалах и магнетизме», Астрахань, 2009; Moscow International Symposium on Magnetism – 2011, 2014, 2017 (Москва); Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (2008, 2009, 2011, 2015 гг.), Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-11 (-12, -13-19), (Ростов-на-Дону. 2008, 2009, 2010, 2015 гг.); 11-ом (12-ом, 13-ом) Международном симпозиуме «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ОДРО-11 (-12, -13), (Ростов-на-Дону. 2008, 2009 и 2010 гг.), Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированной среде», Челябинск, Россия, 24-29 августа 2015 г, Международная конференция Multiferoics-V, 2015, Туапсе, Joint European Magnetic Symposium “JEMS-2018” (3 – 5 september 2018, Mainz, Germany), The 5th International Electronic Conference on Entropy and Its Applications (ECEA 2019), 44th Vietnam Conf. on Theoretical Physics (44th VCTH , Dong Hoi, Vietnam), 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (02 November 2020 to 06 November 2020 in Palm Beach, FL, USA) и других.

### **Личный вклад автора**

Определяющий при постановке научных задач, проведении численных исследований, разработке теоретических моделей, анализе полученных результатов и предоставлении их в печати. Непосредственное создание кода программ Монте-Карло моделирования и метода наискорейшего спуска, анализ и интерпретация результатов моделирования. Постановка задач и проведение основного массива статистических модельных вычислений, анализ их результатов. При этом необходимо отметить следующее. Теоретическое исследование основного состояния в сверхрешетках с диполь-дипольным взаимодействием [102, 104, 105, 108, 221, 224] проведено совместно с А.Г. Нугумановым, постановка задачи о возможном влиянии фрустраций в

подсистемах на свойства скирмионных состояний в распределении намагниченности [103, 131, 173, 221, 222] - совместно с Хунгом Дьепом. Постановка задачи о теоретическом исследовании спектров элементарных возбуждений и применение метода функций Грина и диаграммной техники выполнено совместно М.Х. Харрасовым [103, 156, 206, 173, 211, 214]. Выполнение статистических расчетов совместно с Калимуллиной Л.Б. и Ахмадеевым А.В. было проведено в работе [107]

### **Объем и структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка публикаций автора и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 227 страниц. Диссертация содержит 106 рисунков. Список литературы включает 223 наименований.

Во **Введении** обоснована актуальность темы исследований, изложены цели и задач работы, методы исследования, показана ее научная новизна и значимость, приведены положения, выносимые на защиту, и личный вклад автора.

**Первая глава** посвящена исследованию спектра спиновых волн с учетом влияния внешнего магнитного поля, а также взаимодействия спиновых волн. Исходим из общепринятого гамильтониана в феноменологической теории, включающего энергию однородного и неоднородного взаимодействия, анизотропию, линейный по внешнему постоянному электрическому полю магнитоэлектрический эффект. Анализ спектра невзаимодействующих спиновых волн показывает, что с увеличением значения внешнего магнитного поля энергия колебаний магнитного момента уменьшается до нуля при некотором критическом значении внешнего магнитного поля. Это происходит вследствие того, что вектор магнитного момента второй подрешетки перестраивается под

влиянием возрастающего внешнего магнитного поля. При достижении критического значения магнитного поля магнитные моменты подрешеток кристалла выстраиваются по направлению внешнего магнитного поля. Гамильтониан взаимодействия сегнетоэлектрической и спиновой подсистем выбираем в виде

$$H_{mf} = \int d\bar{x} a_{ijm}^{\alpha\beta} P_i^\alpha M_j^\alpha M_m^\beta$$

В представлении вторичного квантования энергия взаимодействия магнитной и сегнетоэлектрической подсистем имеет вид

$$H_{mf} = \sum_{(k\delta\alpha)} \Psi_{k\delta\alpha}^{mf} c_{k\alpha} [\hat{D}_{-k\delta\alpha} - \hat{D}_{k\delta\alpha}^+],$$

где параметр магнитоэлектрического выражения определяется выражением

$$\Psi_{k\delta\alpha}^{mf} = - \sqrt{\frac{\lambda\mu M_0}{2\pi\epsilon_\delta^f(\vec{k})}} M_{\alpha} a_{ijm} e_{3j}^\alpha e_i^\delta(\vec{k}) Q_{mk}^\alpha (U_{k\delta\alpha} - V_{k\delta\alpha}).$$

Рассмотрена зависимость параметра магнитоэлектрического взаимодействия при наличии внешнего магнитного и электрического полей, а также от направления волнового вектора относительно кристаллографических осей. Показано, что в антисегнетоферромагнетиках при учете релятивистского магнитоэлектрического взаимодействия как верхняя, так и нижняя спиновые ветви могут быть связанными с сегнетоэлектрическими. Как следовало ожидать, параметр магнитоэлектрического взаимодействия имеет ярко выраженный максимум в точке резонанса  $k = k_r$ . Исследованы динамические и кинематические взаимодействия спиновых волн, в антиферромагнитных системах, описываемыми выражениями трех- и четырехчастичного взаимодействия.

С точностью до второго порядка теории возмущений найдена функция Грина и массовый оператор. С помощью диаграммного метода получен вклад в свободную энергию газа магнонов за счет взаимодействия спиновых волн, которое описывается гамильтонианом четырехчастичного взаимодействия спиновых волн друг с другом. Построена температурная зависимость

коэффициента затухания в случаях низких и высоких температур, а также для процессов затухания за счет слияния и за счет распада магнонов.

**Во второй главе** представлены результаты теоретических и численных исследований особенностей фазовых переходов и критических явлений в сверхрешетках мультиферроиков, выполненных с помощью моделирования методами Монте-Карло для двух моделей магнитоэлектрического взаимодействия. Сверхрешетка состоит из чередующихся ферромагнитных и сегнетоэлектрических нанопленок. Исследуются температурные зависимости физических параметров, влияние внешнего магнитного и электрического полей, а также магнитоэлектрической связи на границе нанопленок. Предложено и анализируются две модели магнитоэлектрического взаимодействия между подсистемами сверхрешетки. Магнитная пленка обладает простой кубической решеткой со спинами Гейзенберга на узлах. Сегнетоэлектрическая пленка также обладает простой кубической решеткой, каждому узлу присваивается вектор электрической поляризации  $\vec{P} = (0, 0, P^z)$ ,  $P^z = \pm 1$ . При различных величинах магнитоэлектрического взаимодействия получены значения критических температур, температурные зависимости намагниченностей слоев, поляризаций слоев, внутренней энергии, восприимчивостей, поверхностной намагниченности и поляризации. Аналитическими методами решена задача о нахождении критических температур для магнитной и сегнетоэлектрических пленок сверхрешеток мультиферроиков во внешнем магнитном поле. Получены аналитические выражения для зависимостей намагниченности и поляризации слоев от температуры и структуры пленок. Результаты Монте-Карло моделирования свидетельствуют о том, что перемагничивание системы происходит путем перехода через последовательность метастабильных состояний, каждое из которых имеет свой диапазон устойчивости относительно величины приложенного внешнего поля. Исследовано влияние магнитоэлектрического взаимодействия на критические свойства системы.

**Третья глава** посвящена исследованию другого типа магнитоэлектрического взаимодействия - кирального взаимодействия вида Дзялошинского-Мория на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрических пленок. Как и в предыдущей главе магнитную пленку рассматриваем в виде простой кубической структуры, каждый узел которой обладает гейзенберговским спином, взаимодействующими между собой с обменной энергией  $J$ , а спины на интерфейсе связаны с сегнетоэлектрической пленкой посредством кирального магнитоэлектрического взаимодействия вида Дзялошинского-Мория. Электрические поляризации  $P^z = \pm 1$  на каждом узле простой кубической решетки образуют сегнетоэлектрическую подсистему. С помощью модифицированного метода наискорейшего спуска найдено основное состояние спиновой конфигурации в магнитной пленке.

Рассматриваемая в этой главе модель магнитоэлектрического взаимодействия приводит к тому что, в отсутствии внешнего магнитного поля спиновая конфигурация основного состояния обладает периодической неколлинеарной структурой. Скирмионы образуются на поверхностных и внутренних слоях магнитной пленки при наложении постоянного внешнего магнитного поля, перпендикулярного плоскости слоев сверхрешетки. Известно, что в центросимметричных киральных магнитных пленках в один атомарный слой магнитные скирмионы стабилизируются взаимодействием Дзялошинского-Мория в очень узкой низкотемпературной области диапазона значений напряженностей магнитного поля [4, 56]. В магнитных пленках, где нет сильного взаимодействия Дзялошинского - Мория, магнитные скирмионы неустойчивы и либо коллапсируют, либо трансформируются в доменную структуру лабиринтной формы [207]. Методами численного Монте-Карло моделирования исследованы свойства решеток магнитных скирмионов в пленках с латерально модулированными материальными параметрами или толщиной. Показано, что диаметр стабильного магнитного скирмиона в этом случае может достигать 50 - 100 нм, что сопоставимо с размерами скирмионов в киральных магнитных

материалах. Детально исследованы особенности фазовых переходов в неупорядоченную фазу, найдены температурные зависимости различных физических величин в широком температурном диапазоне – такие как намагниченности слоев, критическая температура, поляризации слоев сегнетоэлектрической пленки при различных величинах магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля.

**В четвертой главе,** используя метод двухвременных температурных функций Грина, исследован спектр спиновых волн, возбуждаемых в однослойной и двухслойной магнитной пленке, находящейся между сегнетоэлектрическими слоями сверхрешетки мультиферроика. Показано, что магнитоэлектрическое взаимодействие сильно влияет на длинноволновую моду спиновых волн. Рассчитана также намагниченность магнитной пленки при низких температурах.

**В пятой главе** исследуется формирование скирмионного кристалла и фазовые переходы в сверхрешетке в фрустрированных магнитной и сегнетоэлектрической пленках. Магнитоэлектрическое взаимодействие принимается такого же вида, как и в предыдущей главе. Обе пленки в сверхрешетке задаются в форме простой кубической решетки. Каждый гейзенберговский спин на узлах решетки магнитной пленки взаимодействует с ближайшими соседними спинами с ферромагнитной обменной энергией  $J^m > 0$  и антиферромагнитной энергией  $J^m < 0$  со спинами, следующими за ближайшими соседними. Аналогичные виды обменных взаимодействий учтены в сегнетоэлектрической пленке, но принимаем, что узлы заполнены квазиинговыми поляризациями. С помощью модифицированного метода наискорейшего спуска рассчитаны спиновые конфигурации основного состояния поверхностных и внутренних слоев фрустрированной магнитной пленки. Показано, что во внешнем постоянном магнитном поле может происходить формирование скирмионной структуры с постоянным периодом в слое на магнитоэлектрическом интерфейсе. Скирмионная кристаллическая структура наиболее ярко проявляется в сильно фрустрированной магнитной пленке. Выполнено моделирование Монте-Карло для

исследования фазовых переходов, определены критические температуры при различных значениях параметра фрустрации.

**В Заключении** сформулированы основные результаты диссертации

## **Глава 1. Динамические взаимодействия в сегнетомагнитных кристаллах во внешних электрическом и магнитном полях**

В данной главе рассматривается влияние постоянных внешних магнитного и электрического полей на параметры магнитоэлектрического взаимодействия в антиферромагнитных кристаллах. Конкретно мы ставим задачу: исследовать характер связанных магнитоэлектрических волн и функциональную зависимость параметра магнитоэлектрического взаимодействия от напряженностей внешних электрического и магнитного полей  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$ . Анализируется также спин-волновая динамика магнитной и сегнетоэлектрической подсистемы в случае двух эквивалентных магнитных подрешеток. В данной главе, на основе теории возмущений, с использованием диаграммной техники для температурных функций Грина, рассмотрена поправка к свободной энергии, обусловленная взаимодействием магнонов. Нами определены зависимости спонтанной намагниченности, спиновой теплоемкости от температуры, а также от внешнего магнитного и электрического полей.

В третьем параграфе вычислено затухание спиновых волн за счет магнон-магнонного взаимодействия. Изучена температурная зависимость затухания в случаях низких и высоких температур, а также для процессов слияния и распада магнонов. Построена графическая зависимость затухания спиновых волн от приложенного внешнего магнитного и электрического поля и температуры. При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации, выполненные автором лично или в соавторстве, в которых согласно положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [106-107, 206, 211, 213-215, 217]. Авторский вклад заключался в участии в постановке задач, выполнении исследования, обсуждении результатов в перечисленных публикациях.

## § 1. Феноменологический гамильтониан антиферромагнитной подсистемы

Рассмотрим одноосный анизотропный антиферромагнитный кристалл, состоящий из двух эквивалентных магнитных подрешеток.

В магнитной части гамильтониана  $H_m$  будем учитывать однородную и неоднородную обменные энергии, энергию анизотропии, а также зеемановскую энергию.

$$H_m = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \left\{ \beta_{jm}^{\alpha\beta} M_j^\alpha M_m^\beta + \alpha_{ijmn}^{\alpha\beta} \frac{\partial M_j^\alpha}{\partial x_j} \frac{\partial M_m^\beta}{\partial x_n} + s_{ijl}^\alpha M_i^\alpha L_j E_l - 2\mathbf{H}(\mathbf{M}^1 + \mathbf{M}^2) \right\} \quad (1.1)$$

где  $\beta_{jm}^{\alpha\beta} = I_{jm}^{\alpha\beta} + \kappa_{jm}^{\alpha\beta}$ ,

$I_{jm}^{\alpha\beta}$  - тензор однородного обменного взаимодействия,

$\kappa_{jm}^{\alpha\beta}$  - тензор анизотропии,

$\alpha_{ijmn}^{\alpha\beta}$  - тензор неоднородного обменного взаимодействия,

$\vec{M}^\alpha$  - намагниченности подрешеток,

$s_{ijl}^\alpha$  - тензор линейного по внешнему электрическому полю  $\mathbf{E}$  магнитоэлектрического эффекта.

Конкретный вид записанных материальных тензоров определяется из требований инвариантности гамильтониана (1.1) относительно группы симметрии кристалла.

Здесь и в дальнейшем примем, что греческие индексы принимают значения 1,2, латинские - 1, 2, 3.

Заметим, что термодинамические и кинетические явления в квантовой статистике эффективно могут быть описаны в терминах квазичастиц. В основополагающих работах Н.Н. Боголюбова предложен уникальный метод канонических  $(u, v)$  -преобразований для описания квазичастиц. В нашем случае, для перехода к квазичастичному описанию, воспользуемся методом приближенного вторичного квантования Н.Н. Боголюбова. Запишем гамильтониан (1.1) в терминах операторов рождения и уничтожения. Магнитные моменты подрешёток  $\vec{M}^\alpha$  выразим с помощью операторов Гольштейна – Примакова  $a_\alpha^+, a_\alpha$  [56]

$$\begin{aligned}\vec{M}^\alpha &= (M_0 - \mu a_\alpha^+ a_\alpha) \vec{e}_3^\alpha + \sqrt{\mu M_0} (\vec{e}_\perp^\alpha a_\alpha + \vec{e}_\perp^{*\alpha} a_\alpha^+) \\ \vec{e}_3^\alpha &= \frac{\vec{M}_0^\alpha}{M_0}, \vec{e}_\perp^\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_1^\alpha + i \vec{e}_2^\alpha), \\ \vec{e}_1^\alpha &\perp_s (\vec{M}_0, \vec{H}_0), \vec{e}_2^\alpha = [\vec{e}_3^\alpha, \vec{e}_1^\alpha],\end{aligned}\tag{1.2}$$

где  $\vec{M}_0^\alpha$  - равновесная намагниченность  $\alpha$  - той подрешетки,  $\mu = g \mu_B$ ,  $g$ - фактор Ланде,  $\mu_B = e \hbar / (2 m_e c)$  - магнетон Бора.

Для перехода к коллективному квазичастичному описанию введем Фурье-преобразование операторов  $a_\alpha^+, a_\alpha$

$$a_\alpha = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) a_{\alpha \vec{k}}, \quad a_\alpha^+ = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) a_{\alpha \vec{k}}^+,$$

где  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \vec{k} \vec{x}}$ ,  $\varphi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i \vec{k} \vec{x}}$  - собственные волновые функции оператора импульса, нормированные на объем.

Примем, что заданы периодические граничные условия

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, n_i = 0, 1, 2, \dots, L^3 = V, \text{ где } V - \text{объем системы.}$$

Заметим, что система функций  $\{\varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\}$  образуют полный ортонормированный базис

$$\sum_{\vec{k}} \varphi_k^*(\vec{x}) \varphi_k'(\vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}'),$$

$$\left( \varphi_k(\vec{x}), \varphi_k'(\vec{x}') \right) \equiv \langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \int \varphi_k^*(\vec{x}) \varphi_k'(\vec{x}) d\vec{x} = \Delta(\vec{k} - \vec{k}').$$

$$\Delta(\vec{k}) = \begin{cases} 1, & \vec{k} = 0 \\ 0, & \vec{k} \neq 0, \end{cases}$$

где  $\delta(\vec{x})$  - дельта - функция.

Тогда в представлении вторичного квантования получим

$$H_m = E_0 + H_{2m} + H_{3m} + H_{4m}. \quad (1.3)$$

$$E_0 = \int d\vec{x} (\chi_{ij}^{\alpha\beta} M_0^2 e_{3i}^\alpha e_{3j}^\beta + s_{ij}^\alpha M_0^2 e_{3i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) - e_{3i}^\alpha H_0 M_0 - \frac{H_0^2}{8\pi} + \quad (1.3a)$$

$$+ \left( 2M_0 e_{3i}^\alpha + \frac{H_0}{2} + \frac{s_{ij}^\alpha}{2} \right) \sqrt{\mu M_0} \sum_{k_\alpha} (e_{\perp i}^{\alpha*} a_{k_1}^+ \Delta(k_1)) + e_{\perp i}^\alpha a_{k_1} \Delta(k_1))$$

$$H_{2m} = \mu M_0 \sum_{k_\alpha, k_\beta} \left[ 2(I_{ijmn}^{\alpha\beta} k^2 e_{\perp i}^{\alpha*} e_{\perp m}^\beta + \chi_{ij}^{\alpha\beta} e_{\perp i}^{\alpha*} e_{\perp j}^\beta + e_{\perp i}^{\alpha*} s_{ij}^\alpha ((e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2))) + \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \chi_{ij}^{\alpha\beta} e_{3i}^\alpha e_{3j}^\beta + 2s_{ij}^\alpha e_{3i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) + \frac{1}{4} H_0 \mu e_{3i}^\alpha a_{k_1}^+ a_{k_1} +$$

$$+ (I_{ijmn}^{\alpha\beta} k^2 e_{\perp i}^\alpha e_{\perp m}^\beta + \chi_{ij}^{\alpha\beta} e_{\perp i}^\alpha e_{\perp j}^\beta + 2s_{ij}^\alpha e_{\perp i}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2)) a_{k_1} a_{k_1} +$$

$$+ (I_{ijmn}^{\alpha\beta} k^2 e_{\perp i}^{\alpha*} e_{\perp m}^{\beta*} + \chi_{ij}^{\alpha\beta} e_{\perp i}^{\alpha*} e_{\perp j}^{\beta*} + 2s_{ij}^\alpha e_{\perp i}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2)) a_{k_1}^+ a_{k_1}^+ \left. \right]$$

$$H_{3m} = -\mu \sqrt{\mu M_0} \sum_{k_i} \left[ 2 \left( (I_{ijmn}^{\alpha\beta} k_1 (k_2 - k_2') - \chi_{ij}^{\alpha\beta}) e_{3i}^\alpha e_{\perp m}^{\beta*} + s_{ij}^\alpha (e_{3j}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2)) + \right. \right.$$

$$+ e_{\perp i}^{\alpha*} (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \left. \right) \Delta(k_1 + k_2 - k_2') a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_2} + [2 (I_{ijmn}^{\alpha\beta} k_1 (k_2 - k_2') + \chi_{ij}^{\alpha\beta}) e_{3i}^\alpha e_{\perp m}^\beta -$$

$$- 2s_{ij}^\alpha (e_{3j}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2) + e_{\perp i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2))] \Delta(k_1 - k_2 - k_2') a_{k_1}^+ a_{k_2} a_{k_2} \left. \right]$$

$$H_{4m} = \sum_{k_i} \left( \chi_{ij}^{\alpha\beta} - I_{ijmn}^{\alpha\beta} \cdot (k_1 - k_1') (k_2 - k_2') + s_{ij}^\alpha e_{3i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) \mu^2 e_{3i}^\alpha e_{3j}^\beta \cdot$$

$$\cdot \Delta(k_1 + k_2 - k_2' - k_1') a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_2} a_{k_1}.$$

Преобразуем гамильтониан  $H_{2M}$ , описывающий систему невзаимодействующих квазичастиц.

Тензоры неоднородного и однородного обменного взаимодействия имеют следующие свойства в виду полной эквивалентности рассматриваемых подрешеток

$$I_{ijmn}^{11} = I_{ijmn}^{22} = I_{ijmn},$$

$$I_{ijmn}^{12} = I_{ijmn}^{21} = I'_{ijmn}.$$

$$\chi_{ij}^{11} = \chi_{ij}^{22} = \chi_{ij},$$

$$\chi_{ij}^{12} = \chi_{ij}^{21} = \chi'_{ij}.$$

Гамильтониан  $H_{2m}$ , при отсутствии взаимодействия, имеет вид стандартной квадратичной формы

$$H_{2m} = \sum_k \left( A_k^{\alpha\beta} a_{\alpha k}^+ a_{\beta k'} + \frac{1}{2} B_k^{\alpha\beta} (a_{\alpha k} a_{\beta k'} + a_{\alpha k}^+ a_{\beta k'}^+) \right), \quad (1.4)$$

где

$$A_k^{\alpha\beta} = \mu M_0 \left\{ 2 \left( I_{zjzn}^{\alpha\beta} k^2 e_{2z}^\alpha e_{2z}^\beta + \chi_{zz}^{\alpha\beta} e_{2z}^\alpha e_{2z}^\beta + s_{zz}^\alpha e_{2z}^\alpha (e_{2z}^1 + e_{2z}^2) + \frac{1}{2} \chi_{zz}^{\alpha\beta} e_{3z}^\alpha e_{3z}^\beta + s_{zz}^\alpha E_l e_{3z}^\alpha (e_{3z}^1 + e_{3z}^2) + \frac{1}{4} H_0 \mu (e_{3z}^\alpha + e_{3x}^\alpha) \right) \right\}. \quad (1.4 \text{ a})$$

$$B_k^{\alpha\beta} = \left( I_{zjzn}^{\alpha\beta} k^2 + \chi_{zz}^{\alpha\beta} + 2s_{ij}^\alpha E_l \right) e_{2z}^\alpha e_{2z}^\beta + 2s_{ij}^\alpha e_{2z}^\alpha (e_{2z}^1 + e_{2z}^2). \quad (1.4 \text{ b})$$

В полученный гамильтониан входят и «перекрестные» произведения операторов рождения и уничтожения. Для диагонализации полученного гамильтониана введем операторы  $f_k^+$ ,  $f_k$  следующим каноническим преобразованием

$$f_{1k} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1k} + a_{2k}), \quad f_{2k} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1k} - a_{2k}),$$

$$f_{1k}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1k}^+ + a_{2k}^+), \quad f_{2k}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1k}^+ - a_{2k}^+)$$

Действительно, простыми вычислениями убеждаемся, что введенные операторы удовлетворяют бозевским соотношениям коммутации.

В терминах новых операторов квадратичная форма  $H_{2m}$  принимает вид

$$H_{2m} = \sum_{k,\gamma} \left( \tilde{A}_\gamma f_{\gamma k}^+ f_{\gamma k} + \frac{1}{2} \tilde{B}_\gamma (f_{\gamma k} f_{\gamma k} + f_{\gamma k}^+ f_{\gamma k}^+) \right). \quad (1.5)$$

$$\tilde{A}_1 = A_k^{11} + A_k^{12} + A_k^{21} + A_k^{22}, \quad \tilde{A}_2 = A_k^{12} - A_k^{11} + A_k^{21} - A_k^{22}. \quad (1.5 \text{ a})$$

$$\tilde{B}_1 = B_k^{11} + B_k^{12} + B_k^{21} + B_k^{22}, \quad \tilde{B}_2 = B_k^{12} - B_k^{11} + B_k^{21} - B_k^{22}. \quad (1.5 \text{ б})$$

Как видно из полученного выражения гамильтониан в переменных  $f_{\gamma k}^+$  и  $f_{\gamma k}$  не является диагональным, но выполненные преобразования существенно упрощают структуру рассматриваемого гамильтониана, поскольку квадратичная форма  $H_{2m}$  в этом случае приведена к «главным осям».

Общий метод диагонализации квадратичной формы из бозевских операторов был дан Н.Н. Боголюбовым и С.В. Тябликовым [1, 2]. Согласно [1, 2] форма (1.5) приводится к диагональному виду с помощью канонического преобразования Н.Н. Боголюбова к новым операторам  $\tilde{c}_{\alpha k}^+$  и  $\tilde{c}_{\alpha k}$

$$\begin{pmatrix} f_{\gamma k} \\ f_{\gamma k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\gamma \alpha k} & v_{\gamma \alpha k}^* \\ v_{\gamma \alpha k} & u_{\gamma \alpha k}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{\alpha k} \\ \tilde{c}_{\alpha k}^+ \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Тогда, можем получить

$$u_{k\gamma\alpha} = \frac{\sqrt{\tilde{A}_\gamma + \tilde{B}_\gamma} + \sqrt{\tilde{A}_\gamma - \tilde{B}_\gamma}}{2\sqrt{\varepsilon_{k\alpha}^m}}, \quad v_{k\gamma\alpha} = -\frac{\sqrt{\tilde{A}_\gamma + \tilde{B}_\gamma} - \sqrt{\tilde{A}_\gamma - \tilde{B}_\gamma}}{2\sqrt{\varepsilon_{k\alpha}^m}}.$$

При этом гамильтониан (1.4) имеет диагональный вид

$$H_{2m} = -\sum_{k\alpha\gamma} \varepsilon_{k\alpha}^m |v_{k\gamma\alpha}^2| + \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha}^m \tilde{c}_{k\alpha}^+ \tilde{c}_{k\alpha}.$$

Здесь первое слагаемое описывает квантовую поправку к энергии основного состояния, связанную с квантовыми нулевыми колебаниями системы. А второе выражение представляет собой сумму энергий отдельных возбуждений

– квазичастиц. Итак, энергия невзаимодействующих спиновых волн задается выражением

$$\varepsilon_{k\alpha}^m = \sqrt{\tilde{A}_\alpha^2 - \tilde{B}_\alpha^2}. \quad (1.7)$$

Следует отметить, что при выполнении преобразования (1.2) появляются члены, линейные по отношению к магнонам.

Такие члены могут быть исключены каноническими преобразованиями и сдвигом операторов. Совершим канонические преобразования по формулам

$$c_{\alpha k} = \tilde{c}_{\alpha k} + \frac{\sqrt{\mu M_0} K e_{\perp i}^{*\alpha} (v_{\alpha\gamma k} + u_{\alpha\gamma k}^*)}{\varepsilon_{\alpha k}^m},$$

$$c_{\alpha k}^+ = \tilde{c}_{\alpha k}^+ + \frac{\sqrt{\mu M_0} K e_{\perp i}^\alpha (u_{\alpha\gamma k} + v_{\alpha\gamma k}^*)}{\varepsilon_{\alpha k}^m}.$$

где

$$K = \Delta(k) \left( 2M_0 e_{3i}^\alpha + \frac{H_0}{2} \right).$$

Подобные преобразования впервые предложены Н.Н. Боголюбовым в работе [2].

Тогда запишем

$$H_{2m} = - \sum_{k\alpha\gamma} \varepsilon_{\gamma k}^m |v_{k\gamma\alpha}^2| + \sum_{k\alpha} \varepsilon_{\alpha k}^m \tilde{c}_{\alpha k}^+ \tilde{c}_{\alpha k} + \sqrt{\mu M_0} K \sum_{k\alpha\gamma} \left( e_{\perp j}^\alpha (u_{\alpha\gamma k} + v_{\alpha\gamma k}^*) \tilde{c}_{\alpha k} + \right.$$

$$\left. + e_{\perp i}^{*\alpha} (v_{k\gamma\alpha} + u_{k\gamma\alpha}^*) \tilde{c}_{k\alpha}^+ \right) = \sum_{\alpha} \left( \varepsilon_{k\alpha}^m c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha} - \varepsilon_{k\alpha}^m v_{k\gamma\alpha}^2 + \frac{[\sqrt{\mu M_0} K e_{\perp m}^\alpha (u_{k\gamma\alpha} + v_{k\gamma\alpha}^*)]^2}{\varepsilon_{k\alpha}^m} \right).$$

В результате мы получаем поправку к энергии нулевых колебаний.

Заметим, что гамильтониан взаимодействия определяется следующим образом

$$H_{4m} = \sum_{k_i} J \Delta(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) c_{k_1}^+ c_{k_2}^+ c_{k'_1} c_{k'_2}, \quad (1.8)$$

$$H_{3m} = \sum_{k_i} \left\{ \Phi_1 \Delta(k_1 + k_2 - k'_1) c_{k_1}^+ c_{k_2}^+ c_{k'_1} + \right. \\ \left. + \Phi_2 \Delta(k_1 - k_2 - k'_1) c_{k_1}^+ c_{k_2} c_{k'_1} \right\} \quad (1.9)$$

Где коэффициенты заданы выражениями

$$J = 4\mu^2 \sum_{k_i} \left( \chi'_{ij} - I'_{ijmn} \cdot (k_1 - k_2)(k'_1 - k'_2) + 2s_{ij} e_{3i} e_{3j} \right) (u_{11k} u_{22k} + \\ + v_{11k} v_{22k}) (u_{12k} u_{21k} + v_{12k} v_{21k}) e_{3i} e_{3j}.$$

$$\Phi_1 = 2 \left( J_2 u_{12k} + v_{21k} J_1 \right), \\ \Phi_2 = 2 \left( J_2 v_{12k} + u_{21k} J_1 \right),$$

$$J_1 = -2\mu\sqrt{\mu M_0} \left[ \left( I'_{ijmn} k_2 (k_1 - k'_1) - \chi'_{ij} \right) e_{3i} e_{\perp m}^* - s'_{ij} \left( e_{3j} (e_{\perp j}^{1*} + e_{\perp j}^{2*}) + \right. \right. \\ \left. \left. + e_{\perp i}^* (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) \right] (u_{12k}^* u_{21k} + v_{12k}^* v_{21k}),$$

$$J_2 = -2\mu\sqrt{\mu M_0} \left[ \left( I'_{ijmn} k_2 (k_1 - k'_1) + \chi'_{ij} \right) e_{3i} e_{\perp m} - 2s'_{ij} \left( e_{3j} (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + e_{\perp i} (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) \right] (u_{12k}^* u_{21k} + v_{12k}^* v_{21k}).$$

При этом, имея ввиду (1.7)–(1.9), получим, что исходный гамильтониан (1.1) в представлении приближенного вторичного квантования в терминах бозе-операторов имеет вид

$$H = E_0 + H_{2m} + H_{3m} + H_{4m}. \quad (1.11)$$

Слагаемое  $H_{3m}$  описывает процессы слияния и распада при столкновениях магнонов.  $H_{4m}$  описывает нелинейные взаимодействия спиновых волн друг с другом.

Спектр невзаимодействующих спиновых волн определяется выражением

$$H_{2m} = \sum_{k,\alpha} \varepsilon_{k\alpha}^m c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha}$$

Энергия основного состояния, с учетом проведенных преобразований, имеет вид

$$E_0 = \int d\bar{x} (\chi_{ij}^{\alpha\beta} M_0^2 e_{3i}^\alpha e_{3j}^\beta + s_{ij}^\alpha M_0^2 e_{3i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) - e_{3i}^\alpha H_0 M_0 - \frac{H_0^2}{8\pi} - \varepsilon_{k\alpha}^m v_{k\gamma\alpha}^2 + \frac{[\sqrt{\mu M_0} K e_{\perp m}^\alpha (u_{k\gamma\alpha} + v_{k\gamma\alpha}^*)]^2}{\varepsilon_{k\alpha}^m}). \quad (1.12)$$

Графические представления для зависимости от внешнего магнитного поля и волнового вектора показаны на рис.1.1 и рис.1.2.

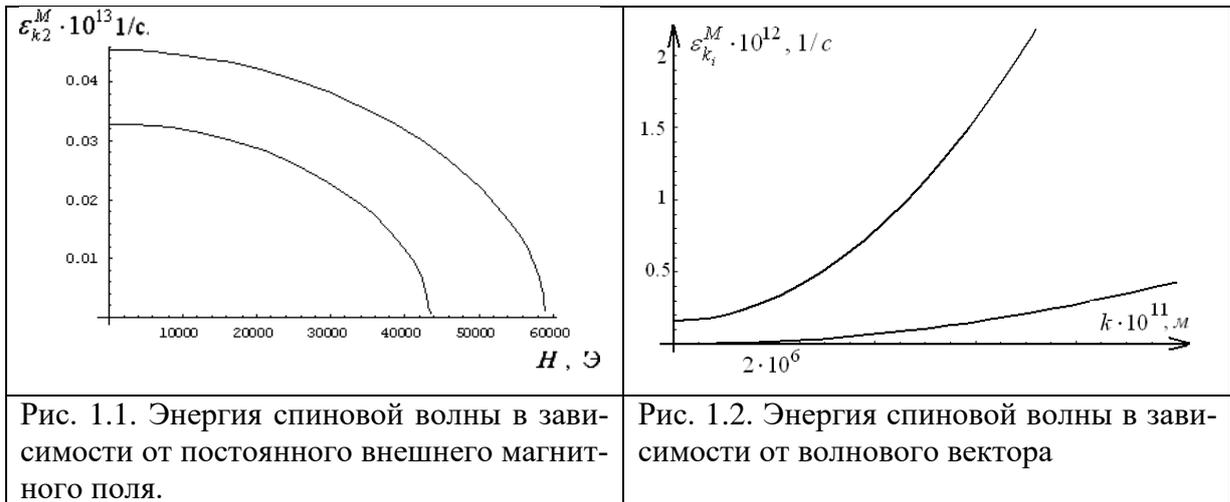


График зависимости спектра невзаимодействующих между собой спиновых волн от внешнего постоянного магнитного поля, имеет вид, изображенный на рисунке 1.1. Из вида полученного графика можно сделать вывод о том, что с увеличением значения внешнего магнитного поля энергия колебаний магнитного момента уменьшается до нуля при некотором критическом значении напряженности внешнего магнитного поля. Это происходит вследствие того, что вектор магнитного момента второй подрешетки, перестраивается под влиянием возрастающего внешнего магнитного поля. При достижении критического значения магнитного поля магнитные моменты подрешеток кристалла выстраиваются по направлению внешнего магнитного поля. Зависимость энергии магнона от волнового вектора представлена на рис. 1.2. Видно, что имеются 2 ветви спиновых волн, отделенные друг от друга щелью.

## § 2. Гамильтониан сегнетоэлектрической подсистемы

Будем исследовать сегнетоэлектрическую подсистему, состоящую из двух эквивалентных векторов поляризации. Сегнетоэлектрическую подсистему опишем гамильтонианом в виде

$$H_f = \int d\vec{x} \left\{ \frac{4\pi}{\lambda} \left[ \Gamma_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\dot{P}_i^\alpha \dot{P}_j^\beta}{2} + \frac{1}{2} S_{ijmn}^{\alpha\beta} \frac{\partial P_i^\alpha}{\partial x_j} \frac{\partial P_m^\beta}{\partial x_n} \right] + \frac{1}{2} \chi_{ij}^{\alpha\beta} P_i^\alpha P_j^\beta - 2\mathbf{E}(\mathbf{P}^1 + \mathbf{P}^2) \right\} \quad (1.12)$$

В гамильтониане учтено влияние постоянного внешнего электрического поля  $\vec{E}$ .

Здесь использованы следующие обозначения:  $P_i^\alpha$  – имеет смысл отклонения вектора поляризации от его равновесного значения,  $\chi_{ij}^{\alpha\beta}$  – тензор обратной диэлектрической восприимчивости,  $S_{ijmn}^{\alpha\beta}$  – тензор корреляционных свойств,  $\lambda$  – квадрат частоты продольных оптических фононов при  $k \rightarrow 0$ , совпадающей по порядку величины с плазменной частотой.

Для того, чтобы привести гамильтониан сегнетоэлектрической подсистемы к диагональному виду, представим отклонение вектора поляризации  $\vec{P}$  от равновесного значения в виде

$$\vec{P} = \sqrt{\frac{\lambda}{8\pi V}} \sum_{(k,\delta)} \frac{\vec{e}^\delta(\vec{k})}{\sqrt{\varepsilon_{\delta\alpha}^f(\vec{k})}} \left( d_{k\delta\alpha} e^{i\vec{k}\vec{x}} + d_{k\delta\alpha}^+ e^{-i\vec{k}\vec{x}} \right)$$

Так как у нас имеется две зеркальные электрические подрешетки, то для упрощения диагонализации нужно ввести следующие операторы

$$\tilde{d}_{k\delta 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{k\delta 2} + d_{k\delta 1}), \quad \tilde{d}_{k\delta 2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{k\delta 2} - d_{k\delta 1}).$$

Чтобы перейти к операторам рождения и уничтожения сегнетонов, необходимо воспользоваться каноническими преобразованиями Боголюбова

$$\tilde{d}_{k\delta\alpha} = U_{k\delta\alpha} D_{k\delta\alpha} + V_{k\delta\alpha}^* D_{-k\delta\alpha}^+. \quad (1.13)$$

Осуществив переход к новым операторам, гамильтониан запишем в виде

$$\tilde{H}_f^\alpha = \sum_{k\delta} E_{k\delta\alpha} D_{k\delta\alpha}^+ D_{k\delta\alpha},$$

где  $E_{k\delta 1} = \sqrt{(\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) + A_{k\delta})^2 - A_{k\delta}^2}$ ,  $E_{k\delta 2} = \sqrt{(\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) - A_{k\delta})^2 - A_{k\delta}^2}$ .

Отметим, что  $A_{k\delta}$  зависит от материальных параметров кристалла.

Величины, входящие в формулу (1.13) задаются выражениями

$$U_{k\delta 1} = \left( \frac{\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) + A_{k\delta} + E_{k\delta 1}}{2E_{k\delta 1}} \right)^{1/2}, V_{k\delta 1} = - \left( \frac{\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) + A_{k\delta} - E_{k\delta 1}}{2E_{k\delta 1}} \right)^{1/2}.$$

$$U_{k\delta 2} = \left( \frac{\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) - A_{k\delta} + E_{k\delta 2}}{2E_{k\delta 2}} \right)^{1/2}, V_{k\delta 2} = - \left( \frac{\varepsilon_\delta^f(\vec{k}) - A_{k\delta} - E_{k\delta 2}}{2E_{k\delta 2}} \right)^{1/2}.$$

$$A_{k\delta} = \frac{2}{\varepsilon_\delta^f(\vec{k})} e_i^\delta(\vec{k}) \left[ \frac{1}{4} e_j^\delta(\vec{k}) S_{imjn}^{12} k_m k_n + \frac{\lambda}{16\pi} e_j^\delta(\vec{k}) \chi_{ij}^{12} + E_i e_j^\delta(\vec{k}) \right].$$

Здесь:  $e_i^\delta(\vec{k})$  – единичный вектор поляризации,  $\varepsilon_\delta^f(\vec{k})$  – спектр в отсутствии взаимодействий между подрешетками,  $D_{k\delta\alpha}^+$ ,  $D_{k\delta\alpha}$  – бозевские операторы рождения и уничтожения квантов электрической поляризации,  $\delta$  – индекс поляризации критического поперечного оптического колебания,  $\delta = 1, 2$ . Спектр в отсутствии взаимодействия между решетками удовлетворяет уравнению

$$D_{ij} e_j^\delta(\vec{k}) \equiv \left( S_{imjn}^{\alpha\beta} k_m k_n + \frac{\lambda}{4\pi} \chi_{ij}^{\alpha\beta} - \delta_{ij} \Gamma_{ij}^{\alpha\beta} (\varepsilon_\delta^f(\vec{k}))^2 \right) e_j^\delta(\vec{k}) = 0,$$

$$\det \|D_{ij}\| = 0.$$

Гамильтониан, описывающий магнитоэлектрическое взаимодействие, выберем в виде [206]

$$H_{mf} = \int d\vec{x} a_{ijm}^{\alpha\beta} P_i^\alpha M_j^\alpha M_m^\beta \quad (1.14)$$

При переходе к операторам вторичного квантования  $\hat{c}_k$ ,  $\hat{D}_{k\delta\alpha}$  энергия взаимодействия магнитной, сегнетоэлектрической подсистем примет вид

$$H_{mf} = \sum_{(k\delta\alpha)} \Psi_{k\delta\alpha}^{mf} c_{k\alpha} \left[ \hat{D}_{-k\delta\alpha} - \hat{D}_{k\delta\alpha}^+ \right],$$

где

$$\Psi_{k\delta\alpha}^{mf} = - \sqrt{\frac{\lambda\mu M_0}{2\pi\varepsilon_\delta^f(\vec{k})}} M_0 a_{ijm} e_3^\alpha e_i^\delta(\vec{k}) Q_{mk}^\alpha (U_{k\delta\alpha} - V_{k\delta\alpha}),$$

$$Q_{mk}^\alpha = e_{\perp m}^\alpha u_{k\alpha} + e_{\perp m}^{*\alpha} v_{k\alpha}.$$

Таким образом, осуществили переход к гамильтониану сегнетоэлектрической подсистемы и гамильтониану взаимодействия сегнетоэлектрической и магнитной подсистем в терминах бозе-операторов  $c_k$ ,  $D_{k\delta\alpha}$ , с помощью канонического  $u, v$  - преобразования Н.Н. Боголюбова.

В зависимости от направления вектора  $\vec{k}$  относительно намагниченностей и поляризацій подрешеток, внешних магнитных и электрических полей, а также величины самого поля для различных магнитных и сегнетоэлектрических волн, магнитоэлектрическое взаимодействие будет различно.

Параметр, характеризующий связь магнитной и сегнетоэлектрической подсистемы - есть отношение параметра магнитоэлектрического взаимодействия к корню квадратному от произведения энергий магнитной и сегнетоэлектрической подрешеток:

$$\zeta_{k\delta\alpha}^{mf} = \Psi_{k\delta\alpha}^{mf} / \sqrt{\varepsilon_{k\alpha}^m E_{k\delta}^f}.$$

Ниже приведены графики (рис. 1.3. - рис. 1.6.)  $\zeta_{k\tau\zeta}(H)$  и  $\zeta_{k\tau\zeta}(E)$  при нулевом волновом векторе.

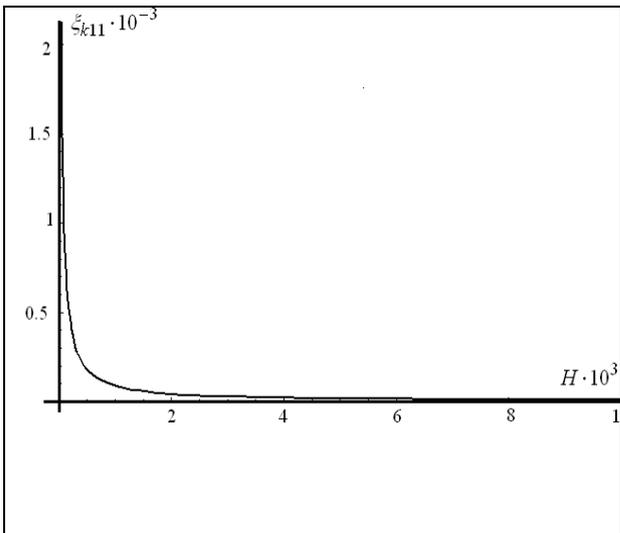


Рис. 1.3. График зависимости  $\zeta_{k\perp 11}^{mf}$  от напряженности магнитного поля.

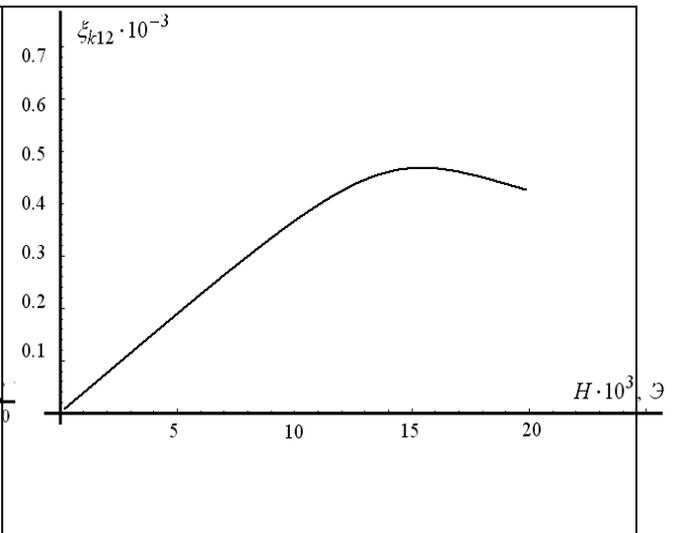


Рис.1.4. График зависимости  $\zeta_{k\perp 211}^{mf}$  от напряженности магнитного поля.

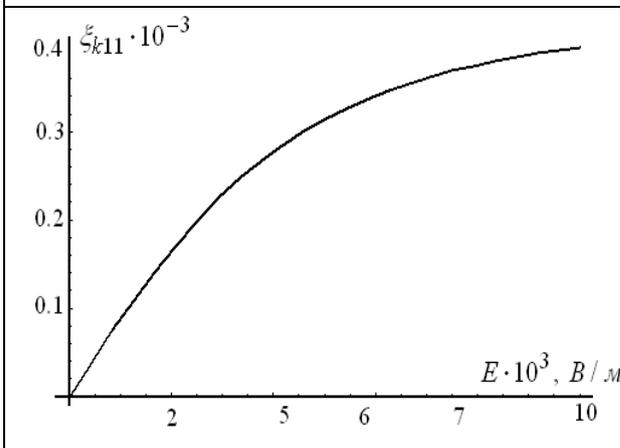


Рис. 1.5. График зависимости  $\zeta_{k\perp 11}^{mf}$  от напряженности электрического поля.

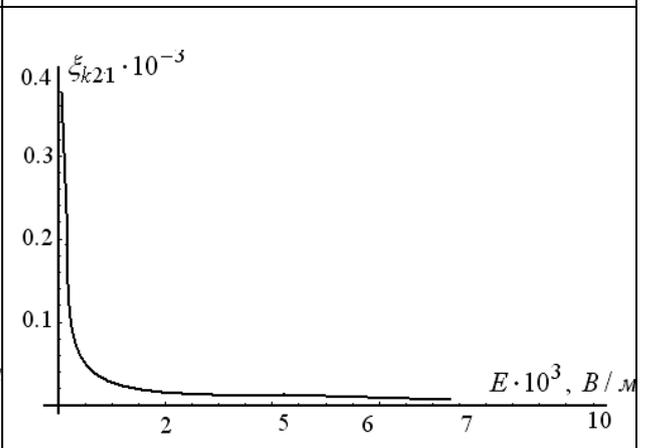


Рис. 1.6. График зависимости  $\zeta_{k\perp 112}^{mf}$  от напряженности электрического поля.

Как видно из приведенных графиков, параметр магнитоэлектрического взаимодействия можно усиливать и ослаблять внешними постоянными магнитным и электрическим полем. Усиление магнитоэлектрического взаимодействия есть в случае, когда симметрия кристалла допускает существование некоторых из компонент магнитоэлектрического тензора. Определив, какие из этих компонент отличны от нуля для данного кристалла и ориентируя должным образом кристалл относительно внешнего магнитного поля, можно экспериментально наблюдать эффект обменного усиления магнитоэлектрической связи.

### § 3. Динамическое и кинематическое взаимодействие спиновых волн в антиферромагнетике во внешнем магнитном поле

Рассмотрим систему с гамильтонианом, описывающим систему взаимодействующих магнонов

$$H = H_{2m} + H_{4m}, \quad (1.15)$$

где  $H_{2m}$  - энергия невзаимодействующих магнонов, а  $H_{4m}$  - энергия взаимодействия

$$H_{2m} = \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha}^m c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha},$$

$$H_{4m} = \sum_{k_i} J^{\alpha\beta} \Delta(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) c_{k_1}^+ c_{k_2}^+ c_{k'_1} c_{k'_2}$$

Явный вид амплитуды  $J^{\alpha\beta}$  задается выражением (1.15).

Введем следующее представление для операторов рождения и уничтожения магнонов  $c_k^+$  и  $c_k$

$$c_k(\tau) = e^{H\tau} c_k e^{-H\tau}, \quad c_k^+(\tau) = e^{-H\tau} c_k^+ e^{H\tau},$$

где  $\tau$  - мнимое время

$$\tau = -i/k_B T = -i\beta,$$

$\beta^{-1}$  - температура в энергетических единицах.

Введем одночастичную температурную функцию Грина, определив ее с помощью операторов рождения и уничтожения частиц. Одночастичную функцию Грина введем в следующем виде

$$G_1(\vec{k}_1\tau_1; \vec{k}_2\tau_2) = -\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}^+(\tau_2) \rangle,$$

где  $T_\tau$  - оператор хронологического упорядочения. В случае Бозе-статистики его действие определяется следующим образом

$$T_{\tau}c_{k_1}(\tau_1)c_{k_2}^+(\tau_2) = \begin{cases} c_{k_1}(\tau_1)c_{k_2}^+(\tau_2), & \tau_1 > \tau_2, \\ c_{k_2}(\tau_2)c_{k_1}^+(\tau_1), & \tau_2 > \tau_1. \end{cases}$$

Заметим, что операторы  $c_k$  и  $c_k^+$  удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[c_k, c_{k'}^+] = \Delta(k - k'), \quad [c_k, c_{k'}] = 0, \quad [c_k^+, c_{k'}^+] = 0.$$

Введем фурье образы функции Грина соотношением [3]

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}; \quad G(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} G(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau.$$

Введем также двухчастичную функцию Грина

$$G_2(\vec{k}_1\tau_1, \vec{k}_2\tau_2; \vec{k}'_1\tau'_1, \vec{k}'_2\tau'_2) = -\langle T_{\tau}c_{k_1}(\tau_1)c_{k_2}(\tau_2)c_{k'_1}^+(\tau'_1)c_{k'_2}^+(\tau'_2) \rangle.$$

Заметим, что функция Грина в нулевом приближении по взаимодействию имеет вид

$$G_1^{(0)}(\vec{k}, \tau) = -\langle T_{\tau}c_k(\tau)c_k^+(0) \rangle_0,$$

где  $c_k(\tau) = e^{-\varepsilon_{k\alpha}^M \tau} c_k$ ,  $c_k^+(\tau) = e^{\varepsilon_{k\alpha}^M \tau} c_k^+$ . Знак  $\langle \dots \rangle_0$  означает усреднение с гамильтонианом невзаимодействующих магнонов

$$\langle \dots \rangle_0 = Sp(\dots e^{-H_{2M}/\theta}) / Sp(e^{-H_{2M}/\theta}),$$

$$H_{2M} = \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha}^m c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha}.$$

Тогда, функции Грина в нулевом приближении задаются выражением

$$G_1^{(0)}(\vec{k}, \tau) = -e^{-\varepsilon_{k\alpha}^m \tau} (1 + n_{k\alpha}), \quad \text{для } \tau > 0,$$

$$n_{k\alpha} = \left( e^{\beta \varepsilon_{k\alpha}^m} - 1 \right)^{-1}.$$

Тогда для одночастичных функций Грина, представляющих среднее значение от Т-произведения операторов  $c_{k_1}(\tau_1)$  и  $c_{k_2}^+(\tau_2)$ , имеем

$$\langle T_{\tau}c_{k_1}(\tau_1)c_{k_2}^+(\tau_2) \rangle_0 = -G_1^{(0)}(\vec{k}_1, \tau_1 - \tau_2) \Delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) =$$

$$= \Delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) e^{-\varepsilon_{k_1}(\tau_1 - \tau_2)} (1 + n_{k_1}), \quad \tau_1 > \tau_2.$$

Заметим, что полученная здесь функция Грина, по сути, есть свертка вида [1]

$$\left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}^+(\tau_2) \right\rangle_0 = \overline{c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}^+(\tau_2)}, \quad \tau_1 > \tau_2$$

Для Фурье-компонент рассматриваемой функции Грина получаем

$$G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}.$$

Далее для вычисления двухчастичной функции Грина  $G_2(\vec{k}_1\tau_1, \vec{k}_2\tau_2; \vec{k}'_1\tau'_1, \vec{k}'_2\tau'_2)$  определим среднее от произведения операторов  $T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k'_1}^+(\tau'_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2)$ .

Учитывая, что  $c_{k_i}(\tau_i) = e^{-\varepsilon_{k_i}(\tau_i)} c_{k_i}$  и  $c_{k'_i}^+(\tau'_i) = e^{-\varepsilon_{k'_i}(\tau'_i)} c_{k'_i}^+$  и правила перестановки для бозевских операторов и  $c_{k'_i}^+, c_{k_i}$  имеем

$$\begin{aligned} T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k'_1}^+(\tau'_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) &= T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_1 - \tau_2)} \Delta(k'_1 - k_2) + \\ &T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_1}^+(\tau'_1) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_2 - \tau_2)} \Delta(k'_2 - k_2) + T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_1}^+(\tau'_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) c_{k_2}(\tau_2), \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k'_1}^+(\tau'_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) - T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_1}^+(\tau'_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) c_{k_2}(\tau_2) &= \\ = T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_1 - \tau_2)} \Delta(k'_1 - k_2) + T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_1}^+(\tau'_1) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_2 - \tau_2)} \Delta(k'_2 - k_2). \end{aligned}$$

Далее вычислим средние от обеих частей этого равенства. Среднее первых двух слагаемых в правой части последнего уравнения принимает вид

$$\left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_2}^+(\tau'_2) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_1 - \tau_2)} \Delta(k'_1 - k_2) \right\rangle_0 = (1 + n_{k_1}) e^{-\varepsilon_{k_2}(\tau_2 - \tau'_1) - \varepsilon_{k_1}(\tau_1 - \tau'_1)} \Delta(\vec{k}'_1 - \vec{k}_2) \Delta(\vec{k}_1 - \vec{k}'_2).$$

$$\left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k'_1}^+(\tau'_1) e^{\varepsilon_{k_2}(\tau'_2 - \tau_2)} \Delta(k'_2 - k_2) \right\rangle_0 = (1 + n_{k_1}) e^{-\varepsilon_{k_2}(\tau_2 - \tau'_2) - \varepsilon_{k_1}(\tau_1 - \tau'_1)} \Delta(\vec{k}'_1 - \vec{k}_1) \Delta(\vec{k}'_2 - \vec{k}_2).$$

Для вычисления  $T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') c_{k_2}(\tau_2)$  воспользуемся инвариантностью этого выражения относительно циклической перестановки.

Тогда, учитывая

$$Sp(c_{k_1}(\tau_1) \rho_0) = Sp(e^{-\beta \varepsilon_{k_1} \tau_1} c_{k_1} \rho_0) = \frac{n_{k_1}}{n_{k_1} + 1} Sp(\rho_0 c_{k_1}),$$

получаем

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') c_{k_2}(\tau_2) \right\rangle_0 &= \frac{n_{k_2}}{n_{k_2} + 1} \left\langle c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}(\tau_1) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 = \\ &= \frac{n_{k_2}}{n_{k_2} + 1} \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 \\ &= \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 - \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') c_{k_2}(\tau_2) \right\rangle_0 = \\ &= \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 - \frac{n_{k_2}}{n_{k_2} + 1} \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) \cdot \right. \\ &\quad \left. \cdot c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 = \frac{\left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0}{n_{k_2} + 1} \end{aligned}$$

Окончательно получим

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 &= (1 + n_{k_2}) (1 + n_{k_1}) e^{-\varepsilon_{k_2}(\tau_2 - \tau_1') - \varepsilon_{k_1}(\tau_1 - \tau_1')} \cdot \\ &\quad \cdot [\Delta(\vec{k}_1' - \vec{k}_2) \Delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2') + e^{-\varepsilon_{k_2}(\tau_2 - \tau_2') - \varepsilon_{k_1}(\tau_1 - \tau_1')} \Delta(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \Delta(\vec{k}_2' - \vec{k}_2)] \end{aligned}$$

Для вычисления средних значений от произведений операторов с гамильтонианом идеального газа магновов воспользуемся теоремой Вика. Так, например

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}^+(\tau_2') \right\rangle_0 &= c_{k_1}(\tau_1) c_{k_1}^+(\tau_1') c_{k_2}(\tau_2) c_{k_2}^+(\tau_2') + \\ &+ \overbrace{c_{k_1}(\tau_1) c_{k_2}^+(\tau_2')} \overbrace{c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^+(\tau_1')} \end{aligned}$$

Заметим далее, что функции Грина во втором порядке теории возмущений имеет структуру

$$G(\vec{k}, \tau) = -\frac{\langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) \cdot (1 + \sigma_1(\beta, \tau') + \sigma_2(\beta, \tau')) \rangle_0}{\langle 1 + \sigma_1(\beta, \tau') + \sigma_2(\beta, \tau') \rangle_0} =$$

$$= G^{(0)}(\vec{k}, \tau) + G^{(1)}(\vec{k}, \tau) + G^{(2)}(\vec{k}, \tau) + \dots, \quad (1.16)$$

$$G^{(1)}(\vec{k}, \tau) = G^{(0)}(\vec{k}, \tau) \int_0^\beta dt' \langle T_\tau H_4(\tau') \rangle_0 + \int_0^\beta d\tau' \langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) H_4(\tau') \rangle_0,$$

$$\text{где } \sigma_1(\beta, \tau) = \int_0^\beta d\tau' \langle H_{4M}(\tau') \rangle_0, \quad \sigma_2(\beta, \tau) = \int_0^\beta d\tau' \left\langle H_{4M}(\tau') \int_0^{\tau'} d\tau'' H_{4M}(\tau'') \right\rangle_0$$

Используя теорему Вика, получим

$$G^{(0)}(\vec{k}, \tau) \int_0^\beta dt' \langle T_\tau H_4(\tau') \rangle_0 = \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0)} \int_0^\beta dt' \langle T_\tau H_4(\tau') \rangle_0,$$

$$\text{где } \int_0^\beta dt' \langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) H_4(\tau') \rangle_0 = -\overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0)} \int_0^\beta dt' \langle T_\tau H_4(\tau') \rangle_0 +$$

$$+ \int_0^\beta d\tau' \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0)} \overbrace{H_4(\tau')}$$

Здесь второй член содержит все нормальные спаривания операторов  $c_k(\tau)$  и  $c_k^+(0)$  с операторами, входящими в выражение  $H_4(\tau)$ .

Подставив полученные свертки в соотношение для  $G^{(1)}(\vec{k}, \tau)$ , находим

$$G^{(1)}(\vec{k}, \tau) = \int_0^\beta d\tau' \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0)} \overbrace{H_4(\tau')} =$$

$$= J^{\alpha\beta} \sum_{k'1, k''1, k'2, k''2} \Delta(k'_1 + k'_2 - k''_1 - k''_2) \left\langle T_{\tau} c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau') c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau') \right\rangle_0,$$

где

$$\begin{aligned} & \left\langle T_{\tau} c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau') c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau') \right\rangle_0 = \\ & = \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau')} + \overbrace{c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau')} + \\ & + \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau')} + \overbrace{c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau')} + \\ & + \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau')} + \overbrace{c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau')} + \\ & + \overbrace{c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau')} + \overbrace{c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau')} \end{aligned}$$

Учитывая структуру оператора взаимодействия относительно операторов рождения  $c_{k'_i}^+$  и уничтожения  $c_{k''_i}$ , запишем

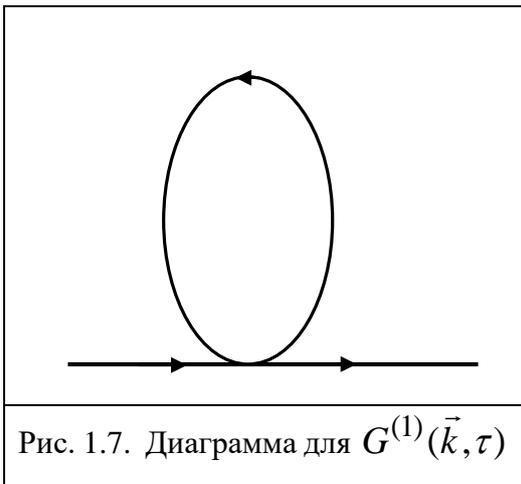


Рис. 1.7. Диаграмма для  $G^{(1)}(\vec{k}, \tau)$

$$\begin{aligned} \overbrace{c_{k''_i} c_{k'_j}^+} &= -G^{(0)}(\vec{k}_i'', \tau = -0) \Delta(\vec{k}_i'' - \vec{k}'_j) = \\ &= -G^{(0)}(\vec{k}_i'', -0) \Delta(\vec{k}_i'' - \vec{k}'_j) . \end{aligned}$$

Диаграмма системы свертки для  $G^{(1)}(\vec{k}, \tau)$  показана на рис.1.7.

Аналитическое выражение для функции Грина в первом порядке теории возмущения

$$G^{(1)}(\vec{k}, \tau) = -J^{\alpha\beta} \sum_{k'1, k''1, k'2, k''2} \Delta(k'_1 + k'_2 - k''_1 - k''_2) G^{(0)}(\vec{k}, \tau - \tau') \cdot G^{(0)}(\vec{k}, \tau') \cdot \left\{ \left[ \Delta(\vec{k} - \vec{k}_1'') \right] \right.$$

$$\cdot \Delta(\vec{k}'_2 - \vec{k}''_2) + \Delta(\vec{k}'_1 - \vec{k}''_2) \Delta(\vec{k}'_2 - \vec{k}''_1) \left[ \Delta(\vec{k} - \vec{k}'_1) \cdot G^{(0)}(\vec{k}'_2, -0) + \left[ \Delta(\vec{k} - \vec{k}''_1) \Delta(\vec{k}' - \vec{k}''_2) + \Delta(\vec{k} - \vec{k}''_2) \Delta(\vec{k}'_1 - \vec{k}''_1) \right] \cdot \Delta(\vec{k} - \vec{k}'_2) \cdot G^{(0)}(\vec{k}'_1, -0) \right]$$

Для «временных» фурье - компонент функции Грина диаграмме на рис. 2 соответствует выражение

$$-J^{\alpha\beta} \sum_{k'} G^{(0)}(\vec{k}', -0) \cdot \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2.$$

Поскольку

$$G^{(0)}(\vec{k}, \tau_1 - \tau_2) = \frac{1}{\beta} \sum_n G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)},$$

$$G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G^{(0)}(\vec{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}.$$

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}.$$

Так как в функцию Грина вклад дают только связные диаграммы, для функции Грина во втором порядке теории возмущений по взаимодействию имеем следующее выражение

$$G^{(2)}(\vec{k}, \tau) = - \int_0^{\beta} d\tau' \int_0^{\beta} d\tau'' c_k(\tau) c_k(0) \overbrace{H_4(\tau') H_4(\tau'')} ,$$

что с учетом (1.8) дает

$$G^{(2)}(\vec{k}, \tau) = - \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau' \int_0^{\beta} d\tau'' J_{\alpha\beta}^2 \Delta(\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}''_1 - \vec{k}''_2) \Delta(\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 - \vec{q}''_1 - \vec{q}''_2) \cdot \left\langle T_{\tau} c_k(\tau) c_k^{\dagger}(0) c_{k'_1}^{\dagger}(\tau') c_{k'_2}^{\dagger}(\tau') c_{k''_1}(\tau'') c_{k''_2}(\tau'') c_{q'_1}^{\dagger}(\tau'') c_{q'_2}^{\dagger}(\tau'') c_{q''_1}(\tau'') c_{q''_2}(\tau'') \right\rangle_0.$$

На основе теоремы Вика в этом выражении получим три типа комбинаций сверток. Первый тип

$$\overbrace{c_k(\tau)c_k^+(0)c_{k_1}^+(\tau')c_{k_2}^+(\tau')c_{k_1}(\tau')c_{k_2}(\tau')c_{q_1}^+(\tau'')c_{q_2}^+(\tau'')c_{q_1}(\tau'')c_{q_2}(\tau'')} (1.17)$$

Данной системе сверток соответствует выражение

$$G^{(2)}(\vec{k}, \tau) = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' J_{\alpha\beta}^2 \Delta(\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}''_1 - \vec{k}''_2) \Delta(\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 - \vec{q}''_1 - \vec{q}''_2) G^{(0)}(\vec{k}, \tau - \tau').$$

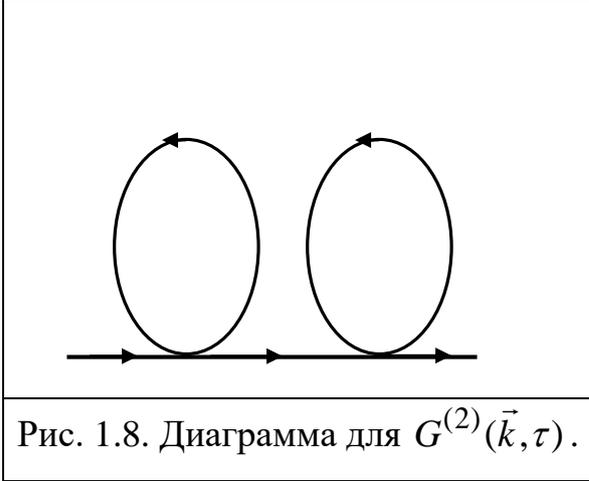


Рис. 1.8. Диаграмма для  $G^{(2)}(\vec{k}, \tau)$ .

$$\begin{aligned} & \cdot G^{(0)}(\vec{k}_1'', -0) G^{(0)}(\vec{k}_2'', \tau' - \tau'') G^{(0)}(\vec{q}_1'', -0) \cdot \\ & \cdot G^{(0)}(\vec{q}_2'', \tau'') \Delta(\vec{k} - \vec{k}'_1) \Delta(\vec{k}_1'' - \vec{k}'_2) \Delta(\vec{k}_2'' - \vec{q}'_1) \cdot \\ & \cdot (\vec{q}_1'' - \vec{q}'_2) \Delta(\vec{q}_2'' - \vec{k}). \end{aligned}$$

Диаграмма для системы сверток (1.17) изображена на рис. 1.8. Данной диаграмме можно сопоставить следующее выражение

$$-(J^{\alpha\beta})^2 \sum_{k'} G^{(0)}(\vec{k}', -0) G^{(0)}(\vec{k}'', -0) \cdot [G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n)]^3.$$

Следующий тип вкладов получаем из системы сверток вида

$$\overbrace{c_k(\tau)c_k^+(0)c_{k_1}^+(\tau')c_{k_2}^+(\tau')c_{k_1}(\tau')c_{k_2}(\tau')c_{q_1}^+(\tau'')c_{q_2}^+(\tau'')c_{q_1}(\tau'')c_{q_2}(\tau'')} (1.19)$$

Системе свертков (1.19) соответствует следующий вклад в функцию Грина во втором порядке теории возмущений

$$G^{(2)}(\vec{k}, \tau) = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' J_{\alpha\beta}^2 \Delta(\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}''_1 - \vec{k}''_2) \Delta(\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 - \vec{q}''_1 - \vec{q}''_2) G^{(0)}(\vec{k}, \tau - \tau') \cdot$$

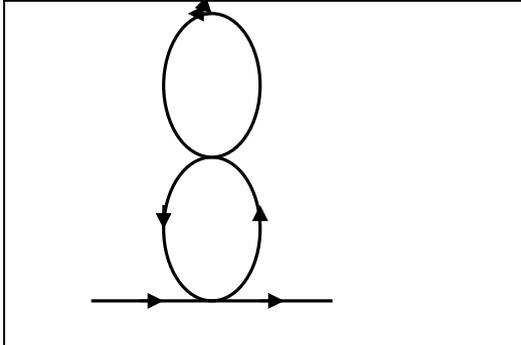


Рис. 1.9. Диаграмма для  $G^{(2)}(\vec{k}, \tau)$ .

$$\cdot G^{(0)}(\vec{k}''_1, \tau') G^{(0)}(\vec{k}''_2, \tau' - \tau'') G^{(0)}(\vec{q}''_1, -0) \cdot$$

$$\cdot G^{(0)}(\vec{q}''_2, \tau'' - \tau') \Delta(\vec{k} - \vec{k}'_1) \Delta(\vec{k}''_1 - \vec{k}) \Delta(\vec{k}''_2 - \vec{q}'_1) \cdot (\vec{q}''_1 - \vec{q}'_2) \Delta(\vec{q}''_2 - \vec{k}'_2).$$

Данному вкладу соответствует графическая диаграмма, изображенная на рис. 1.9.

Вклад в фурье-представлении для данной диаграммы

$$-\frac{(J^{\alpha\beta})^2}{\beta} \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} G^{(0)}(\vec{k}', -0) \cdot [G^{(0)}(\vec{k}'', i\omega_n)]^2 [G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n)]^2.$$

Последний тип вкладов в функцию Грина второго порядка разложения в ряд теории возмущений по взаимодействию образуется из свертков вида

$$c_k(\tau) c_k^+(0) c_{k'_1}^+(\tau') c_{k'_2}^+(\tau') c_{k''_1}(\tau') c_{k''_2}(\tau') c_{q'_1}^+(\tau'') c_{q'_2}^+(\tau'') c_{q''_1}(\tau'') c_{q''_2}(\tau''). \quad (1.20)$$

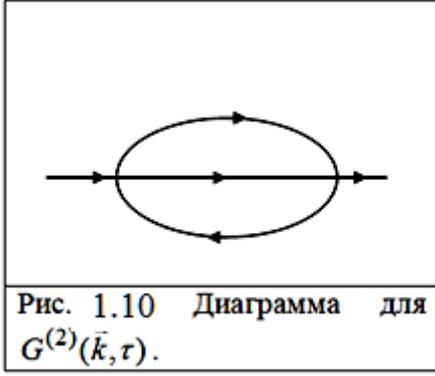


Рис. 1.10 Диаграмма для  $G^{(2)}(\vec{k}, \tau)$ .

Системе сверток соответствует вклад

$$G^{(2)}(\vec{k}, \tau) = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' J_{\alpha\beta}^2 \Delta(\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}_1'' - \vec{k}_2'') \Delta(\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 - \vec{q}_1'' - \vec{q}_2'') G^{(0)}(\vec{k}, \tau - \tau') \cdot G^{(0)}(\vec{k}_2'', \tau' - \tau'') G^{(0)}(\vec{k}_1'', \tau' - \tau'').$$

$$\cdot G^{(0)}(\vec{q}_1'', \tau'' - \tau) G^{(0)}(\vec{q}_2'', \tau'') \Delta(\vec{k} - \vec{k}'_1) \Delta(\vec{k}_2'' - \vec{q}'_1) \cdot \Delta(\vec{k}_1'' - \vec{q}'_2) \Delta(\vec{q}'_1 - \vec{k}'_2) \Delta(\vec{q}'_2 - \vec{k}).$$

Диаграмма данного выражения показана на рис. 1.10. Выражение для временной компоненты для диаграммы на рис.1.10. имеет следующий вид

$$\frac{(J^{\alpha\beta})^2}{2\beta^2} \sum_{\vec{k}'_2, \vec{k}''_1, \vec{k}''_2} \sum_{\omega'_2, \omega''_1, \omega''_2} \Delta(\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}_1'' - \vec{k}_2'') \Delta(\omega_n + \omega'_2 - \omega''_1 - \omega''_2) \cdot G^{(0)}(\vec{k}'_2, i\omega'_2) \cdot G^{(0)}(\vec{k}_1'', i\omega''_1) \cdot G^{(0)}(\vec{k}_2'', i\omega''_2) [G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n)]^2.$$

Графический ряд для массового оператора представлен на рис. 1.11

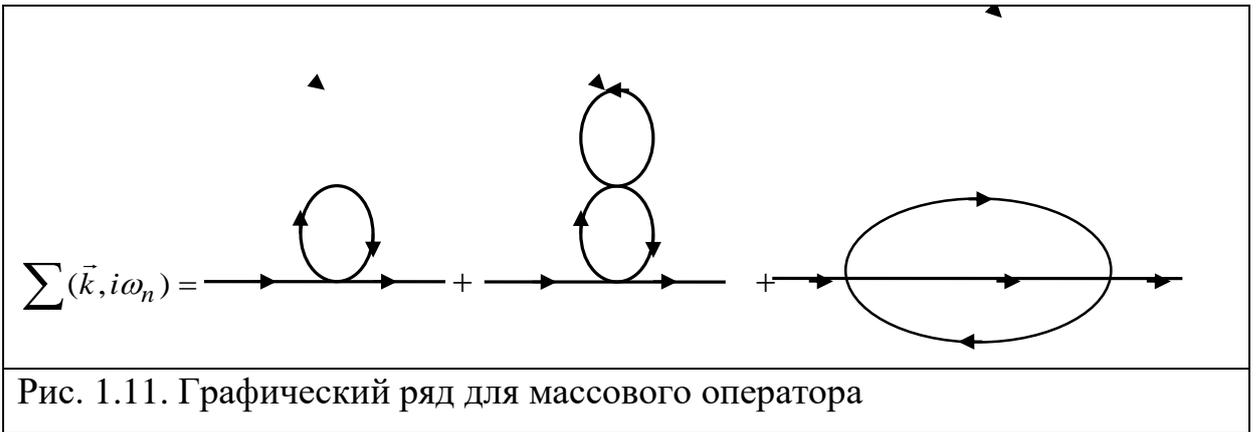


Рис. 1.11. Графический ряд для массового оператора

Этому графическому ряду соответствует разложение по степеням  $G^{(0)}$

$$\sum(\vec{k}, i\omega_n) = -J^{\alpha\beta} \sum_{k'} G^{(0)}(\vec{k}', -0) + \frac{(J^{\alpha\beta})^2}{\beta} \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} \sum_{\omega''} G^{(0)}(\vec{k}', -0).$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left[ G^{(0)}(\vec{k}'', i\omega'') \right]^2 + \frac{(J\alpha\beta)^2}{2\beta^2} \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} \sum_{\omega', \omega''} G^{(0)}(\vec{k}', i\omega') \cdot G^{(0)}(\vec{k}'', i\omega'') \\ & \cdot G^{(0)}(\vec{k} + \vec{k}' - \vec{k}'', i(\omega + \omega' - \omega'')). \quad (1.21) \end{aligned}$$

Суммируя по частотам от произведений нулевых функций Грина

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k)}.$$

Учитывая известное соотношение [3]

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x - 2\pi i n} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(x) - 1}, \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta},$$

получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k)} = (-1) \sum_{\omega_n} \frac{1}{\beta \varepsilon_k - \frac{\beta i 2\pi n}{\beta}} = \\ &= (-1) \sum_{\omega_n} \frac{1}{\beta \varepsilon_k - 2\pi i n} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{\exp(\beta \varepsilon_k) - 1} = -\frac{1}{2} - n_k, \quad (1.22) \end{aligned}$$

$$n_k = \frac{1}{\exp(\beta \varepsilon_k) - 1}.$$

Найдем далее сумму функции Грина  $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2$

Для этого учтем соотношение (1.22). Тогда,

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k)} \right\} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left( -\frac{1}{2} - n_k \right) = \frac{e^{\beta \varepsilon_k}}{(e^{\beta \varepsilon_k} - 1)^2}.$$

Выражая здесь  $e^{\beta \varepsilon_k}$  через средние числа заполнения  $n_k$ , получим

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k)} \right\} = \frac{e^{\beta \varepsilon_k}}{(e^{\beta \varepsilon_k} - 1)^2} = n_k (n_k + 1)$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} [G^{(0)}(\vec{k}', i\omega_n)]^2 = n_{k'} (1 + n_{k'})$$

Теперь можем записать, что сумма по частотам от произведений нескольких функций Грина принимает вид

$$\begin{aligned} \beta^{-2} \sum_{\omega', \omega''} G^{(0)}(\vec{k}', i\omega') \cdot G^{(0)}(\vec{k}'', i\omega'') \cdot G^{(0)}(\vec{k} + \vec{k}' - \vec{k}'', i(\omega + \omega' - \omega'')) = \\ = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega'} \frac{1}{i\omega' - \varepsilon_{k'}} \frac{1}{i\omega_n - i\omega' - \varepsilon_{k+k''-k'} + \varepsilon_{k''}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega''} \frac{1}{i\omega'' - \varepsilon_{k''}} \cdot \\ \frac{1}{i\omega_n + i\omega'' - i\omega' - \varepsilon_{k+k''-k'} + \varepsilon_{k''}} = \frac{-\frac{1}{2} - n_{k''} + \frac{1}{2} + n_{k+k''-k'}}{i\omega_n + \varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+k''-k'}} \frac{1}{\beta} \cdot \\ \cdot \sum_{\omega'} \left( \frac{1}{i\omega' - \varepsilon_{k'}} + \frac{1}{i\omega_n - i\omega' - \varepsilon_{k+k''-k'} + \varepsilon_{k''}} \right) = \\ = \frac{(n_{k+k''-k'} + 1 + n_{k'}) n_{k''} - n_{k'} n_{k+k''-k'}}{i\omega_n + \varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+k''-k'}} \end{aligned}$$

В результате для массового оператора (1.21) получаем

$$\begin{aligned} \sum (\vec{k}, i\omega_n) = J_{\alpha\beta} \sum_{k''} n_{k''} - \frac{1}{\beta} \sum_{k', k''} J_{\alpha\beta}^2 n_{k''} n_{k'} (1 + n_{k'}) + \\ + \frac{1}{2\beta^2} \sum_{k', k''} J_{\alpha\beta}^2 \frac{(n_{k+k''-k'} + 1 + n_{k'}) n_{k''} - n_{k'} n_{k+k''-k'}}{i\omega_n + \varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+k''-k'}} \quad (1.23) \end{aligned}$$

В дальнейшем это выражение для массового оператора будет использовано для получения коэффициентов затухания.

## § 4. Свободная энергия газа магнонов

Здесь вычислим поправку к свободной энергии магнонов, обусловленную их взаимодействием. Рассмотрим свободную энергию газа магнонов, которая определяется выражением

$$F = E_0 + T \sum_k \ln \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{k_\alpha}^m}{T}\right) \right\} + \Delta F.$$

Первое слагаемое представляет собой энергию основного состояния, выражение (1.12). Во втором слагаемом величина  $\varepsilon_{k_\alpha}^m$  представляет собой спектр невзаимодействующих спиновых волн.

$$\varepsilon_{k_\alpha}^m = \sqrt{\tilde{A}_\alpha^2 - \tilde{B}_\alpha^2}.$$

Последнее слагаемое связано с взаимодействием спиновых волн друг с другом и определяется выражением

$$\Delta F = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau H_4(\tau_1) \dots H_4(\tau_n) \rangle_0.$$

Вычисление свертки в последнем выражении можно произвести по теореме Вика. Тогда будем иметь сумму произведений связанной системы свертки, описываемыми диаграммами на рис. 1.12.

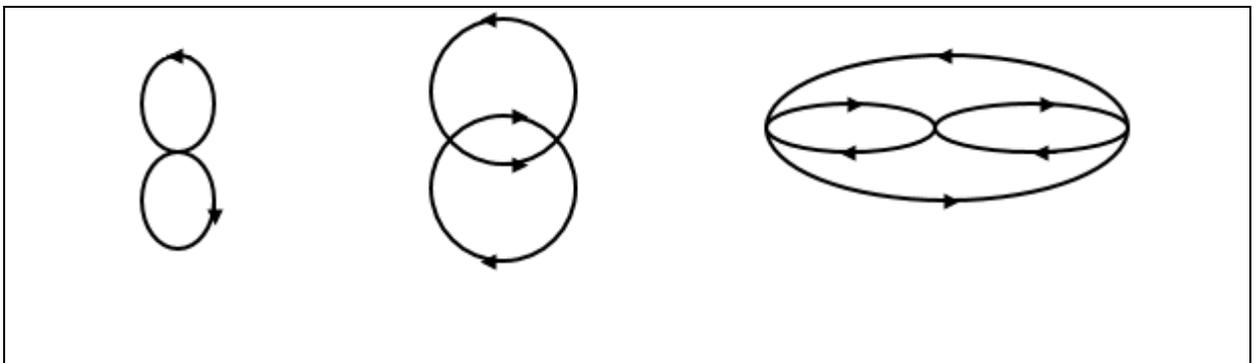


Рис. 1.12. Графический ряд для  $\Delta F$ .

Аналитическое выражение для первой диаграммы есть

$$\beta\Delta F_{(1)} = \left(-\frac{1}{2}\right) \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} J_{\alpha\beta} G^{(0)}(\vec{k}'', -0) G^{(0)}(\vec{k}', -0).$$

Вторая и последняя диаграммы описываются следующими выражениями

$$\beta\Delta F_{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta} \sum_{\omega_k} G^{(0)}(\vec{k}'', -0) G^{(0)}(\vec{k}', -0) \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_k) \right]^2.$$

$$\beta\Delta F_{(3)} = \frac{1}{8} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^3} \sum_{\omega_k, \omega', \omega''} G^{(0)}(\vec{k}'', i\omega'') G^{(0)}(\vec{k}', i\omega') G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_k) \cdot \\ \cdot G^{(0)}(\vec{k}' + \vec{k}'' - \vec{k}, i(\omega' + \omega'' - \omega_k)).$$

Просуммировав по частотам, для поправки в свободную энергию, связанную с взаимодействием спиновых волн, получим

$$\Delta F = \left(-\frac{1}{2\beta}\right) \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} J_{\alpha\beta} n_{\vec{k}'} n_{\vec{k}''} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} n_{\vec{k}'} n_{\vec{k}''} n_{\vec{k}} (1 + n_{\vec{k}}) - \\ - \frac{1}{8} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^4} \frac{n_{\vec{k}'} n_{\vec{k}''} (1 + n_{\vec{k}} + n_{\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{k}}) - n_{\vec{k}} n_{\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{k}} (1 + n_{\vec{k}'} + n_{\vec{k}''})}{\varepsilon_{\vec{k}'} + \varepsilon_{\vec{k}''} - \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{k}}}. \quad (1.24)$$

Заметим, что суммирование по импульсам заменяются интегрированием с помощью преобразования

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int k^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi,$$

где интегрирование ведется в первой зоне Бриллюэна.

Рассмотрим конкретный случай. Пусть  $\vec{H}_0 \parallel OZ$ ,  $\vec{k} = (0, 0, k)$ .

Заметим, что

$$H_{4m} = \sum_{k_i} J^{\alpha\beta} \Delta(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) c_{k_{1\alpha}}^+ c_{k_{2\alpha}}^+ c_{k_{2\alpha}} c_{k_{1\alpha}},$$

где

$$J^{\alpha\beta} = \sum_{k_i} \left( \chi_{ij}^{\alpha\beta} - I_{ijmn}^{\alpha\beta} \cdot (k_1 - k_2)(k'_1 - k'_2) + s_{ij}^{\alpha} e_{3i}^{\alpha} (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) (u_{k_{1\alpha}} u_{k_{2\alpha}} + v_{k_{1\alpha}} v_{k_{2\alpha}}) \mu^2 (u_{k_{1\alpha}} u_{k_{2\alpha}} + v_{k_{1\alpha}} v_{k_{2\alpha}}) e_{3i}^{\alpha} e_{3j}^{\beta}.$$

Отсюда видно, что  $J^{\alpha\beta}$  зависит от импульсов через функции  $u_k, v_k$ .

Рассмотрим выражение для спектра невзаимодействующих магнонов

$$\varepsilon_{k_\alpha}^m = \sqrt{\tilde{A}_\alpha^2 - \tilde{B}_\alpha^2}.$$

В нашем случае

$$\varepsilon_{k_\alpha}^m = 2\mu M_0 I_{zjzn}^{\alpha\alpha} k^2 + C_1 = bk^2 + C_1 \quad (1.25)$$

Здесь учтено, что

$$b = 2\mu M_0 I_{zjzn}^{\alpha\alpha} \quad (1.26)$$

$$C_1 = 2\mu M_0 \left\{ \chi_{zz}^{\alpha\beta} \left( e_{2z}^{\alpha} e_{2z}^{\beta} + \frac{1}{2} e_{3z}^{\alpha} e_{3z}^{\beta} \right) + s_{zz}^{\alpha} E_z \left( e_{2z}^{\alpha} (e_{2z}^1 + e_{2z}^2) e_{3z}^{\alpha} (e_{3z}^1 + e_{3z}^2) \right) + \frac{1}{4} H_{0z} \mu (e_{3z}^{\alpha} + e_{3x}^{\alpha}) \right\} \quad (1.27)$$

Тогда для первого слагаемого в (1.24) можем записать

$$\left( -\frac{1}{2\beta} \right) \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} J_{\alpha\beta} n_{k'} n_{k''} = J_{\alpha\beta} \int_0^{p_d} n_p p^2 dp \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta d\varphi \int_0^{k_d} n_k k^2 dk \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Верхний предел интегрирования равен  $p_d = k_d = \frac{3(2\pi)^3}{4\pi a_1 a_2 a_3}$ .

$$J_{\alpha\beta} \int_0^{p_d} n_p n_k p^2 dp \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{J_{\alpha\beta}}{\beta^2} (4\pi)^2 \int_0^{p_d} \frac{p^2 dp}{\exp(\beta(bp^2 + c_1)) - 1} \cdot \int_0^{p_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1)) - 1}.$$

Второе слагаемое для  $\Delta F$  (1.24) равно

$$\frac{1}{2} \sum_{\bar{k}, \bar{k}', \bar{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} n_{\bar{k}'} n_{\bar{k}''} n_{\bar{k}} (1 + n_{\bar{k}}) = \frac{J_{\alpha\beta}}{\beta^3} (4\pi)^3 \left\{ \int_0^{p_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1)) - 1} \cdot \int_0^{k_d'} \frac{k'^2 dk'}{\exp(\beta(bk'^2 + c_1)) - 1} \cdot \int_0^{k_d''} \frac{k''^2 dk''}{\exp(\beta(bk''^2 + c_1)) - 1} \left( 1 + \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1)) - 1} \right) \right\}.$$

Вычисляя последнее слагаемое в (1.24), получаем

$$\frac{1}{8} \cdot \sum_{\bar{k}, \bar{k}', \bar{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^4} \frac{n_{\bar{k}'} n_{\bar{k}''} (1 + n_{\bar{k}} + n_{\bar{k}'+\bar{k}''-\bar{k}}) - n_{\bar{k}} n_{\bar{k}'+\bar{k}''-\bar{k}} (1 + n_{\bar{k}'} + n_{\bar{k}''})}{\varepsilon_{\bar{k}'} + \varepsilon_{\bar{k}''} - \varepsilon_{\bar{k}} - \varepsilon_{\bar{k}'+\bar{k}''-\bar{k}}} = \frac{1}{32} \cdot \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^4} (4\pi)^4 \iiint_{k_d} [n_{\bar{k}'} n_{\bar{k}''} (1 + n_{\bar{k}} + n_{\bar{k}'+\bar{k}''-\bar{k}}) - n_{\bar{k}} n_{\bar{k}'+\bar{k}''-\bar{k}} (1 + n_{\bar{k}'} + n_{\bar{k}''})].$$

В этом выражении средние числа заполнений  $n_k$  определены интегралом

$$n_k = \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1)) - 1}$$

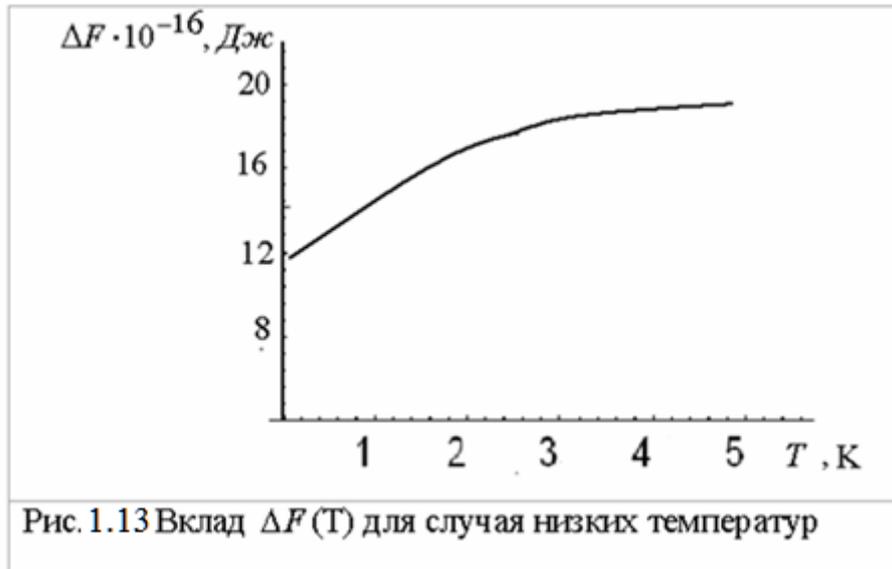
Теперь оценим вклад в свободную энергию за счет взаимодействия спиновых волн в случаях низких и высоких температур.

1. Случай низких температур, когда  $\varepsilon_{k_\alpha}^m / k_B T \gg 1$

В этом приближении

$$n_k = \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1))} = \frac{2\sqrt{\beta} \exp(-\beta(C_1 + bk_d^2)) \left[ \exp(\beta bk_d^2) \int_0^{k_d} \exp(-\beta bk^2) dk - k_d \right]}{4\beta^{3/2}}$$

Соответственно, вклад  $\Delta F$  для случая низких температур, определяемый формулой (1.24) в зависимости от температуры показан на рис. 1.13.



## 2. Случай высоких температур

$$\frac{\varepsilon_{k\alpha}^m}{k_B T} \ll 1, T \leq T_C$$

Тогда, принимая приближенно

$$e^{\beta \varepsilon_p} \cong 1 + \beta \varepsilon_p.$$

$$e^{\beta(\varepsilon_p + \varepsilon_k)} \cong 1 + \beta(\varepsilon_p + \varepsilon_k).$$

и учитывая, что

$$n_k = \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{\exp(\beta(bk^2 + c_1)) - 1} = \frac{1}{\beta} \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{bk^2 + c_1},$$

первое слагаемое в (1.24) можем записать в виде

$$J_{\alpha\beta} \int_0^{p_d} n_p n_k p^2 dp \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{J_{\alpha\beta}}{\beta^4} (4\pi)^2 \int_0^{p_d} \frac{p^2 dp}{p^2 + c_1} \int_0^{p_d} \frac{k^2 dk}{k^2 + c_1}.$$

Аналогично, второе слагаемое для  $\Delta F$  (1.25) принимает вид

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} n_{\vec{k}} n_{\vec{k}''} n_{\vec{k}} (1 + n_{\vec{k}}) = \frac{J_{\alpha\beta}}{\beta^5} (4\pi)^3 \left\{ \int_0^{p_d} \frac{k^2 dk}{k^2 + c_1} \cdot \int_0^{k'_d} \frac{k'^2 dk'}{k'^2 + c_1} \cdot \int_0^{k''_d} \frac{k''^2 dk''}{k''^2 + c_1} \cdot \left( 1 + \frac{1}{\beta} \int_0^{k_d} \frac{k^2 dk}{k^2 + c_1} \right) \right\}.$$

Для последнего слагаемого в (1.24) получим выражение

$$\frac{1}{32} \cdot \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^4} (4\pi)^4 \iiint_{k_d} [n_{\vec{k}} n_{\vec{k}''} (1 + n_{\vec{k}} + n_{\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{k}}) - n_{\vec{k}} n_{\vec{k}'+\vec{k}''-\vec{k}} (1 + n_{\vec{k}'} + n_{\vec{k}''})]$$

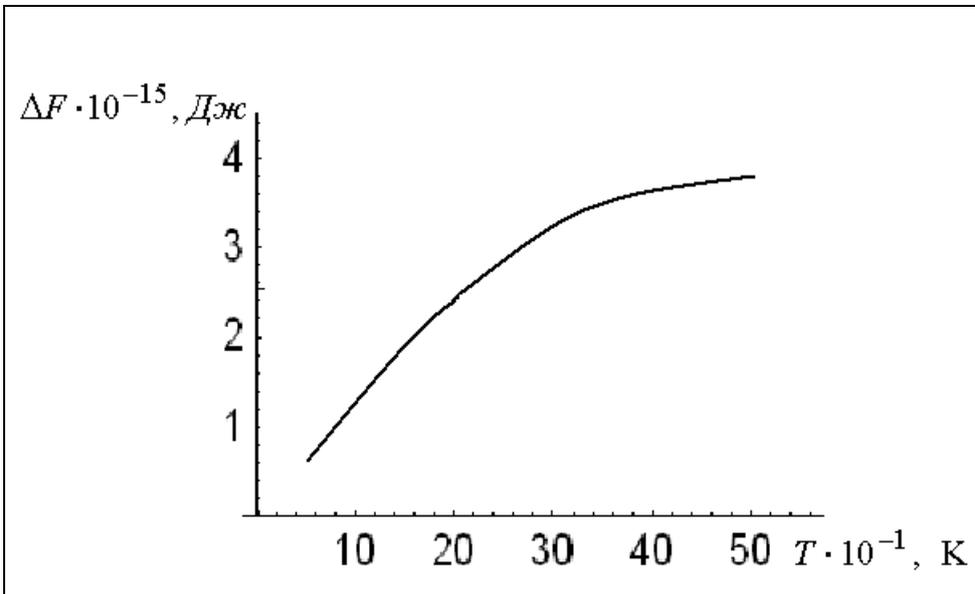


Рис. 1.14. Вклад  $\Delta F(T)$  для случая высокотемпературного предела

Соответственно, вклад  $\Delta F$  в свободную энергию газа магнонов для случая высоких температур, определяемый формулой (1.25) в зависимости от температуры показан на рис. 1.14.

Дифференцированием свободной энергии по внешнему магнитному полю, получим спонтанную намагниченность

$$\langle \vec{M} \rangle = - \frac{\partial F}{\partial \vec{H}}.$$

Свободная энергия имеет вид

$$F = E_0 + T \sum_k \ln \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{k_\alpha}^m}{T}\right) \right\} + \Delta F,$$

где  $\Delta F$  определяется выражением (1.24).

Рассмотрим свободную энергию невзаимодействующих магнов

$$F_0 = E_0 + T \sum_k \ln \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{k_\alpha}^m}{T}\right) \right\},$$

которая определяет, в частности, намагни-

ченность насыщения.

Величина магнитного момента при этом будет равна

$$M_0 = -\frac{\partial F_0}{\partial H} = -\frac{\partial E_0}{\partial H} - 4\pi \int_0^{k_d} \frac{\frac{1}{2} \mu^2 M_0 (e_{3z}^\alpha + e_{3x}^\alpha) k^2 e^{-\varepsilon_k^m / T}}{1 - e^{-\varepsilon_k^m / T}} dk,$$

где  $\varepsilon_k$  имеет вид (1.25).

При высоких температурах, используя приближение

$$\ln \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_k^m}{T}\right) \right\} = \ln \left\{ \frac{\varepsilon_k^m}{T} \right\},$$

для намагниченности  $M$  получим выражение

$$M = -\frac{\partial F_0}{\partial H} = -\frac{\partial E_0}{\partial H} - 2\pi \frac{k_d^3}{3} \mu^2 M_0 (e_{3z}^\alpha + e_{3x}^\alpha),$$

где

$$F_0 = E_0 + 4\pi T \left\{ \frac{bk_d^5}{5T} + \frac{c_1 k_d^3}{3T} \right\}.$$

Энергия нулевых колебаний определяется выражением

$$E_0 = \int d\vec{x} \left( \chi_{ij}^{\alpha\beta} M_0^2 e_{3i}^\alpha e_{3j}^\beta + s_{ij}^\alpha M_0^2 e_{3i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) - e_{3i}^\alpha H_0 M_0 - \frac{H_0^2}{8\pi} - \varepsilon_{k_\alpha}^m v_{k_{\gamma\alpha}}^2 + \frac{\left[ \sqrt{\mu M_0} K e_{\perp m}^\alpha (u_{k_{\gamma\alpha}} + v_{k_{\gamma\alpha}}^*) \right]^2}{\varepsilon_{k_\alpha}^m} \right),$$

где  $K = \Delta(k) \left( 2M_0 e_{3i}^\alpha + \frac{H}{2} \right)$ .

Запишем приращение свободной энергии в виде

$$\Delta F = \left(-\frac{1}{2\beta}\right) J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) + \frac{1}{2} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} (4\pi)^3 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) \times V(\beta, t_D),$$

$$\text{где } W(\beta, k_D) = \int_0^{k_D} n_k k^2 dk, \quad W(\beta, p_D) = \int_0^{p_D} n_p p^2 dp, \quad V(\beta, t_D) = \int_0^{t_D} n_t (1 + n_t) t^2 dt,$$

$$\int_0^{k_D} n_k k^2 dk = \int_0^{k_D} \frac{k^2}{\exp(\beta \varepsilon_{k_1}^m) - 1} dk,$$

Приращение намагниченности, обусловленное взаимодействием газа магнов, вычисляется по формуле

$$\delta \vec{M} = -\frac{\partial \Delta F}{\partial \vec{H}}$$

Рассмотрим антисегнетоантиферромагнетик со структурой перовскита.

В случае  $\vec{H}_0 \parallel OZ$ , и  $\vec{k} = (0, 0, k)$  запишем

$$\begin{aligned} \delta M = & -\frac{\partial \Delta F}{\partial H_0} = \left(-\frac{1}{2\beta}\right) \delta J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) - \\ & \left(-\frac{1}{2\beta}\right) J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 [\delta W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) + W(\beta, k_D) \delta W(\beta, p_D)] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} (4\pi)^3 [\delta W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) V(\beta, t_D) + W(\beta, k_D) \delta W(\beta, p_D) V(\beta, t_D) + \\ & + W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) \delta V(\beta, t_D)] + \frac{J_{\alpha\beta}}{\beta^2} \delta J_{\alpha\beta} (4\pi)^3 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) V(\beta, t_D), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\delta J_{\alpha\beta} &= \frac{\partial J_{\alpha\beta}}{\partial H_0} = 8\pi(\chi_{ij}^{11} + \chi_{ij}^{12} + s_{ij}^1 e_{3i}^1 (e_{3j}^1 + e_{3j}^2)) \int_0^{k_D} k^2 (u_{k11} u_{k21} + v_{k11} v_{k21}) Q_1 dk + \\
&+ 8\pi(\chi_{ij}^{21} + \chi_{ij}^{22} + s_{ij}^2 e_{3i}^2 (e_{3j}^2 + e_{3j}^1)) \int_0^{k_D} k^2 (u_{k12} u_{k22} + v_{k12} v_{k22}) Q_2 dk, \\
\delta W(\beta, k_D) &= \frac{\partial W(\beta, k_D)}{\partial H_0} = \frac{\partial}{\partial H_0} \int_0^{k_D} n_k k^2 dk = - \int_0^{k_D} \frac{\beta k^2 \exp(\beta \varepsilon_k^m)}{(\exp(\beta \varepsilon_k^m) - 1)^2} \frac{\partial \varepsilon_k^m}{\partial H_0} dk, \quad (6.5) \\
\delta V(\beta, t_D) &= \frac{\partial V(\beta, t_D)}{\partial H_0} = \frac{\partial}{\partial H_0} \int_0^{t_D} n_t (1 + n_t) t^2 dt = - \int_0^{t_D} \beta \frac{t^2 \exp(\beta \varepsilon_t^m) \varepsilon_t^m}{(\exp(\beta \varepsilon_t^m) - 1)^2} \frac{\partial \varepsilon_t^m}{\partial H_0} dt - \\
&- 2\beta \int_0^{t_D} \frac{t^2 \exp(\beta \varepsilon_t^m)}{(\exp(\beta \varepsilon_t^m) - 1)^3} \frac{\partial \varepsilon_t^m}{\partial H_0} dt.
\end{aligned}$$

По определению, теплоемкость (при постоянном давлении) как термодинамическая величина определяется по формуле

$$c_p = \theta \frac{\partial^2 \Delta F}{\partial \theta^2} = 2\beta^2 \frac{\partial \Delta F}{\partial \beta} + \beta^3 \frac{\partial^2 \Delta F}{\partial \beta^2},$$

где  $\theta = k_B T = \frac{1}{\beta}$  - термодинамическая температура, тогда

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Delta F}{\partial \beta} &= S_1 + S_2, \\
S_1 &= \left(\frac{1}{2\beta^2}\right) J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) - \\
&- \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^3} (4\pi)^3 W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) V(\beta, t_D),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_2 = & \left(-\frac{1}{2\beta}\right) J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 \frac{\partial W(\beta, k_D)}{\partial \beta} W(\beta, p_D) + \left(-\frac{1}{2\beta}\right) J_{\alpha\beta} (4\pi)^2 \frac{\partial W(\beta, p_D)}{\partial \beta} W(\beta, k_D) + \\
& + \frac{1}{2} \frac{J_{\alpha\beta}^2}{\beta^2} (4\pi)^3 \left[ \frac{\partial W(\beta, k_D)}{\partial \beta} W(\beta, p_D) V(\beta, t_D) + W(\beta, k_D) \frac{\partial W(\beta, p_D)}{\partial \beta} V(\beta, t_D) + \right. \\
& \left. + W(\beta, k_D) W(\beta, p_D) \frac{\partial V(\beta, t_D)}{\partial \beta} \right],
\end{aligned}$$

В этом параграфе найдено выражение для вклада в свободную энергию в результате взаимодействия магнонов, которое описывается гамильтонианом вида (1.6) для случая антисегнетоантиферромагнетика орторомбической симметрии. Найдены также выражения для намагниченности и спиновой теплоемкости.

## § 5. Затухание спиновых волн за счет магнон-магнонного взаимодействия

В гамильтониане магнитной подсистемы присутствует также гамильтониан взаимодействия, который не сохраняет число частиц

$$H_{3m} = \sum_{k_i} \left\{ F_1 c_{k_\alpha}^+ c_{k'_\alpha}^+ c_{k''_\alpha} + F_2 c_{k_\alpha}^+ c_{k'_\alpha} c_{k''_\alpha} \right\}, \quad (1.28)$$

где  $F_2 = \Phi_2 \Delta(k - k' - k'')$ ,  $F_1 = \Phi_1 \Delta(k + k' - k'')$ .

Коэффициенты  $\Phi_2$  и  $\Phi_1$ , входящие в гамильтониан взаимодействия, определяются в соответствии с формулой (1.10). Это взаимодействие будет оказывать большее влияние на релаксационные процессы спиновых волн, по сравнению с взаимодействием  $H_{4m}$ . При таком гамильтониане взаимодействия, кроме нормальных функций Грина отличными от нуля оказываются и аномальные функции Грина, обусловленные нарушением градиентной инвариантности  $[\hat{N}, H = 0]$  [1].

Гамильтониан, для учета затухания энергии спиновых волн за счет магнон-магнонного взаимодействия, выберем в виде

$$H = H_{2m} + H_{3m},$$

$H_{2m}$  - энергия невзаимодействующих спиновых волн.

$$\begin{aligned} H_{2m} &= \sum_k \varepsilon_{k_\alpha}^m c_{k_\alpha}^+ c_{k_\alpha} \\ G^{(1)}(\vec{k}, \tau) &= \sum_{\vec{p}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \left\langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) \cdot H_{3m} \right\rangle_0 = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \left\langle \Phi_2 T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') + \right. \end{aligned}$$

$$+ \Phi_1 T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_{q''}(\tau'') \rangle_0 \cdot \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{p}'').$$

Как видно из этого соотношения, в каждом слагаемом в правой части данного выражения, число операторов рождения не равно числу операторов уничтожения магнонов. В силу этого,  $G^{(1)}(\vec{k}, \tau) = 0$  так как среднее значение от нечетного числа операторов равно нулю. Для вклада в функцию Грина во втором порядке теории возмущений по взаимодействию  $G^{(2)}(\vec{k}, \tau)$ , получим следующее выражение

$$\begin{aligned} G^{(2)}(\vec{k}, \tau) &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) \cdot H_{3m} H_{3m} \rangle_0 = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \langle \Phi_2^2 T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') \cdot \\ &\cdot c_{q'}(\tau'') c_{q''}(\tau'') + \Phi_1 \Phi_2 T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') \cdot \\ &\cdot c_{q''}(\tau'') + \Phi_2^2 T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'') \rangle_0 \cdot \\ &\cdot \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{p}'') \Delta(\vec{q} - \vec{q}' + \vec{q}'') = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \Phi_1 \Phi_2 \langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') \cdot \\ &\cdot c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'') \rangle_0 \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{p}'') \Delta(\vec{q} - \vec{q}' + \vec{q}''). \end{aligned}$$

При выводе данного соотношения приравниваются к нулю слагаемые, которые содержат не равные числа операторов рождения и уничтожения.

Теперь необходимо вычислить среднее от величины

$$\langle T_\tau c_k(\tau) c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'') \rangle_0.$$

Применив теорему Вика к данному соотношению, получим пять групп сверток. Первая группа

$$c_k(\tau) \overbrace{c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'')}.$$

Данной системе сверток соответствует вклад в функцию Грина во втором порядке теории возмущений

$$\frac{1}{4\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \Phi_1 \Phi_2 \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{p}'') \Delta(\vec{q} - \vec{q}' + \vec{q}'') \cdot G^{(0)}(\vec{k}, \tau'' - \tau) \cdot G^{(0)}(\vec{p}', \tau') \cdot G^{(0)}(\vec{p}, 0) G^{(0)}(\vec{q}'', 0).$$

В частотном представлении соответственно

$$\frac{1}{4\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 G^{(0)}(\vec{q}'', -0) G^{(0)}(\vec{p}, -0) \Delta(\omega_n) \Delta(\vec{k} - \vec{p}') \quad (1.29)$$

Вторую группу сверток можно представить в следующем виде

$$c_k(\tau) \overbrace{c_k^+(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'')}.$$

В частотном представлении вклад в функцию Грина примет вид соответственно

$$\frac{1}{4\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') \cdot G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \Delta(\omega_n + \omega'' - \omega') \Delta(\vec{k} + \vec{q}'' - \vec{p}'). \quad (1.30)$$

Третья группа сверток

$$c_k(\tau) \overbrace{c_k^+(0)} \overbrace{c_{p'}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'')}.$$

Вклад в функцию Грина для данной системы сверток принимает вид

$$\frac{1}{8\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') \cdot G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \Delta(\omega_n - \omega'' - \omega') \Delta(\vec{k} - \vec{q}'' - \vec{p}'). \quad (1.31)$$

Ещё одна, четвертая группа сверток для вклада в функцию Грина во втором порядке теории возмущений по взаимодействию, примет следующий вид

$$c_k(\tau) \overbrace{c_k^+(0)} \overbrace{c_{p'}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'')}.$$

Вклад в функцию Грина для данной системы сверток принимает вид

$$\frac{1}{4\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') \cdot G^{(0)}(\vec{p}, 0) \Delta(\omega'' - \omega') \cdot \Delta(\vec{q} - \vec{p}') \quad (1.32)$$

Последняя, пятая группа сверток

$$c_k(\tau) \overbrace{c_k^+(0)} \overbrace{c_{p'}^+(\tau') c_{p'}(\tau') c_p(\tau') c_q^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_{q''}(\tau'')}.$$

Вклад в функцию Грина для последней системы сверток можно записать в следующем виде

$$\frac{\beta}{4} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left[ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 G^{(0)}(\vec{q}, 0) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \cdot \Delta(\omega' - \omega'') \cdot \Delta(\vec{p} - \vec{q}) \quad (1.33)$$

Для гамильтонианов взаимодействия, не сохраняющих число частиц, отличными от нуля будут не только нормальные, но также и аномальные функции Грина [3]. Приведем расчет аномальных функции Грина, руководствуясь теорией возмущений по взаимодействию. Также, как и для нормальных функции Грина, слагаемые первого порядка по взаимодействию аномальных функции Грина, равны нулю, в силу того, что содержат неравное количество операторов рождения и уничтожения магнов.

$$\begin{aligned}
F^{(2)}(\vec{k}, \tau) &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \langle T_\tau c_k(\tau) c_{-k}(0) \cdot H_{3m} H_{3m} \rangle_0 = \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \Phi_1^2 \langle T_\tau c_k(\tau) c_{-k}(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_{q''}^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_q(\tau'') \rangle_0
\end{aligned}$$

В данном случае отличный от нуля вклад дают три типа сверток.

Первый тип сверток имеет следующую структуру

$$\begin{array}{c}
\overbrace{c_k(\tau) c_{-k}(0)} \quad \overbrace{c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau')} \quad \overbrace{c_p(\tau') c_{q''}^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_q(\tau'')} \\
\hline
\end{array}$$

Вклад в аномальную функцию Грина второго порядка в частотном представлении будет равен

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{2\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \Phi_1^2 G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) G^{(0)}(-\vec{k}, -i\omega_n) G^{(0)}(\vec{p}, 0) \cdot \\
& \quad \cdot G^{(0)}(\vec{q}, 0) \cdot \Delta(\omega - \omega' - \omega'') \cdot \Delta(\vec{k} - \vec{q}).
\end{aligned} \tag{1.34}$$

Второй тип сверток имеет следующую структуру

$$c_k(\tau) \overbrace{c_{-k}(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_{q''}^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_q(\tau'')}.$$

Соответствующее аналитическое выражение в частотном представлении можно записать следующим образом

$$-\frac{1}{2\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \Phi_1^2 G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) G^{(0)}(-\vec{k}, -i\omega_n) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \cdot G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') \cdot \Delta(\omega + \omega'' - \omega') \cdot \Delta(\vec{p} - \vec{k} - \vec{q}) \quad (1.35)$$

Заключительная система свертков для вклада второго порядка теории возмущений в аномальную функцию Грина имеет вид

$$c_k(\tau) \overbrace{c_{-k}(0) c_{p''}^+(\tau') c_{p'}^+(\tau') c_p(\tau') c_{q''}^+(\tau'') c_{q'}^+(\tau'') c_q(\tau'')}.$$

Вклад в функцию Грина для данной системы свертков принимает вид

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \Phi_1^2 G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) G^{(0)}(-\vec{k}, -i\omega_n) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') G^{(0)}(\vec{q}, 0) \Delta(\omega - \omega') \Delta(\vec{p} - \vec{k}) \quad (1.36)$$

Следует отметить, что вклад в аномальную функцию Грина во втором порядке теории возмущений по взаимодействию

$$F^{(2)+}(\vec{k}, \tau) = \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \langle T_\tau c_k^+(\tau) c_{-k}^+(0) \cdot H_{3M} H_{3M} \rangle_0,$$

в частотном представлении совпадает с выражениями (1.34) – (1.36).

Как известно, массовый оператор  $\sum(\vec{k}, i\omega_n)$  - это сумма всех неприводимых собственно энергетических частей диаграмм.

Массовому оператору для случая взаимодействия, которое можно описать гамильтонианом (1.28), соответствует аналитическая запись

$$\begin{aligned} \sum (\vec{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{4\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1 \Phi_2 \left\{ G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \cdot \right. \\ &\cdot \left. \left[ G^{(0)}(\vec{k} + \vec{q} - \vec{p}, i(\omega_n + \omega'' - \omega')) \right]^2 + \frac{1}{2} \left[ G^{(0)}(\vec{k} - \vec{q} - \vec{p}, i(\omega_n - \omega'' - \omega')) \right]^2 \right\} + \\ &\left[ G^{(0)}(\vec{k} + \vec{q} - \vec{p}, i(\omega_n + \omega'' - \omega')) \right]^2 \left( G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') G^{(0)}(\vec{p}, 0) - (G^{(0)}(\vec{q}, 0) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega')) \right) \Big\} \\ &- \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \Phi_1^2 \left\{ G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) G^{(0)}(-\vec{k} + \vec{p} - \vec{q}, -i(\omega_n + \omega' - \omega'')) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') \cdot G^{(0)}(\vec{q}, i\omega'') \right. \\ &\left. + G^{(0)}(\vec{k} - \vec{p} + \vec{q}, i(\omega_n - \omega')) G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) G^{(0)}(\vec{p}, i\omega') G^{(0)}(\vec{q}, 0) \right\} \end{aligned}$$

В рамках принятой техники здесь нужно провести суммирование по частотам от произведений нулевых функций Грина

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G^{(0)}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k)}$$

Вывод формул произведем способом, рассмотренным в §3 главы 1.

Получим, что массовый оператор равен

$$\begin{aligned} \sum (\vec{k}, i\omega_n) &= -\Phi_1 \Phi_2 \sum_{p,q} n_q n_p (1 + n_p) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k', k''} (2\Phi_1 \Phi_2 + \Phi_1^2) \frac{\binom{p,q}{n_{k+q-p} + 1 + n_p} n_q - n_p n_{k+q-p}}{i\omega_n + \varepsilon_q - \varepsilon_p - \varepsilon_{k+q-p}} \end{aligned} \quad (1.37)$$

В данном выражении  $n_p$ , например, определяется следующим выражением

$$n_k = \frac{1}{\exp(\beta \varepsilon_k) - 1}$$

Мнимая часть массового оператора определяет затухание спиновых волн за счет магнон-магнонного взаимодействия [3]. Используя известное соотношение обобщенных функций

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x),$$

для затухания за счет взаимодействия магнонов, описываемого гамильтонианом (1.28), получим выражение

$$\begin{aligned} \text{Im} \sum (\vec{k}, i\omega_n) = \sum_p (\Phi_1 \Phi_2 [\langle v_p \rangle - \langle v_{k+p} \rangle] \delta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{k+p}) + \\ \sum_p (\Phi_1 \Phi_2 + \Phi_1^2) [1 + \langle v_p \rangle + \langle v_{k+p} \rangle] \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{k+p}) \end{aligned} \quad (1.38)$$

Для анализа мнимой части массового оператора удобно ввести следующее представление [206] температурно зависящей части затухания за счет трехмагнонных процессов слияния

$$\gamma_k = \langle v_p \rangle - \langle v_{k+p} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p)} - 1}$$

Заметим, что

$$\frac{1}{e^x - 1} \approx \frac{1}{2} \text{cth} \frac{x}{2} - \frac{1}{2}$$

И выражение для  $\gamma_k$  в случае процессов слияния магнонов примет следующий вид

$$\gamma_k = \frac{1}{2} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p}{2}\right) - \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p + \beta\varepsilon_k}{2}\right) \right]$$

Для случая распада магнонов запишем

$$\gamma_k = 1 + \langle v_p \rangle + \langle v_{k+p} \rangle = 1 + \frac{1}{2} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p}{2}\right) + \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p + \beta\varepsilon_k}{2}\right) \right]$$

Данное положение подтверждено экспериментом [54], в высокотемпературном пределе данное затухание прямо пропорционально температуре.

Заметим, что при высоких температурах:  $\varepsilon_p / k_B \theta \ll 1$  можно использовать разложение

$$e^{\beta \varepsilon_p} \cong 1 + \beta \varepsilon_p$$

$$e^{\beta(\varepsilon_p + \varepsilon_k)} \cong 1 + \beta(\varepsilon_p + \varepsilon_k)$$

Тогда для температурного коэффициента затухания в процессе слияния

$$\gamma_k = \frac{1}{\beta \varepsilon_p} - \frac{1}{\beta \varepsilon_p + \beta \varepsilon_k} = \frac{\beta \varepsilon_k}{\beta^2 \varepsilon_p (\varepsilon_p + \varepsilon_k)} = \frac{\varepsilon_k}{\beta \varepsilon_p (\varepsilon_p + \varepsilon_k)} =$$

$$= k_B T \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_p (\varepsilon_p + \varepsilon_k)} \approx \text{const} \cdot T$$

Для температурного коэффициента затухания в процессе расщепления магнонов можем записать

$$\gamma_k = 1 + \langle v_p \rangle + \langle v(\varepsilon_k - \varepsilon_p) \rangle = 1 + \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_p} - 1} + \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k - \beta \varepsilon_p} - 1} =$$

$$= 1 + \frac{1}{\beta \varepsilon_p} - \frac{1}{\beta \varepsilon_p - \beta \varepsilon_k} \approx \text{const} \cdot T$$

Рассмотрим конкретный случай. Пусть  $\vec{H}_0 \parallel OZ$ ,  $\vec{k} = (0, 0, k)$ . Заметим, что в определении трехчастичного гамильтониана взаимодействия (1.10)

$$\Phi_1 = \left( 2J_2^{\alpha\beta} u_{k_{2\alpha}} + 2v_{k_{2\alpha}} J_1^{\alpha\beta} \right),$$

$$\Phi_2 = \left( 2J_2^{\alpha\beta} v_{k_{1\alpha}} + 2u_{k_{1\alpha}} J_1^{\alpha\beta} \right),$$

В свою очередь, входящие в данные выражения коэффициенты примут вид

$$J_1^{\alpha\beta} = -2\mu\sqrt{\mu M_0} \left[ I_{ijmn}^{\alpha\beta} k_2 (k_1 - k'_1) - \chi_{ij}^{\alpha\beta} \right] e_{3i}^\alpha e_{\perp m}^{*\beta} - s_{ij}^\alpha \left( e_{3j}^\alpha (e_{\perp j}^{1*} + e_{\perp j}^{2*}) + \right.$$

$$\left. + e_{\perp i}^{\alpha*} (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) \left( u_{k_{1\alpha}}^* u_{\gamma_{2\alpha}} + v_{k_{1\alpha}}^* v_{k_{2\alpha}} \right)$$

$$J_2^{\alpha\beta} = -2\mu\sqrt{\mu M_0} \left[ I_{ijmn}^{\alpha\beta} k_1 (k_2 - k'_2) + \chi_{ij}^{\alpha\beta} \right] e_{3i}^\alpha e_{\perp m}^\beta - 2s_{ij}^\alpha \left( e_{3j}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2) + \right.$$

$$\left. + e_{\perp i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2) \right) \left( u_{k_{1\alpha}}^* u_{k_{2\alpha}} + v_{k_{1\alpha}}^* v_{k_{2\alpha}} \right)$$

Для рассматриваемого случая можем записать

$$\Phi_1 = -4\mu\sqrt{\mu M_0} \left[ \chi_{ij}^{\alpha\beta} e_{3i}^\alpha e_{\perp m}^\beta - 2s_{ij}^\alpha (e_{3j}^\alpha (e_{\perp j}^1 + e_{\perp j}^2) + e_{\perp i}^\alpha (e_{3j}^1 + e_{3j}^2)) \right],$$

$$\Phi_2 = \Phi_1$$

Согласно (1.38), выражение для затухания запишем в следующем виде

$$\begin{aligned} \text{Im} \sum (\vec{k}, i\omega_n) = & \sum_p \left[ \Phi_1^2 \frac{1}{2} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p}{2}\right) - \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p + \beta\varepsilon_k}{2}\right) \right] + \right. \\ & \left. + 2\Phi_1^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p}{2}\right) + \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p + \beta\varepsilon_k}{2}\right) \right] \right) \right] \end{aligned} \quad (1.39)$$

Выражение для спектра невзаимодействующих магнонов в рассматриваемом случае имеет следующий вид

$$\varepsilon_{k_\alpha}^m = \tilde{A}_\alpha + \Delta\varepsilon = 2\mu M_0 I_{zjn}^{\alpha\alpha} k^2 + C_1 = L_{jn}^{\alpha\alpha} k^2 + C_1$$

Здесь учтено, что

$$\begin{aligned} C_1 = 2\mu M_0 \left\{ \left( \chi_{zz}^{\alpha\beta} \left( e_{2z}^\alpha e_{2z}^\beta + \frac{1}{2} e_{3z}^\alpha e_{3z}^\beta \right) + s_{zz}^\alpha E_z \left( e_{2z}^\alpha (e_{2z}^1 + e_{2z}^2) e_{3z}^\alpha (e_{3z}^1 + e_{3z}^2) \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4} H_{0z} \mu (e_{3z}^\alpha + e_{3x}^\alpha) \right\} \end{aligned}$$

$$L_{jn}^{\alpha\alpha} = 2\mu M_0 I_{zjn}^{\alpha\alpha}$$

Заметим, что суммирование по импульсам заменяются интегрированием с помощью преобразования

$$\sum_k \rightarrow \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int k^2 dk \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\varphi$$

Окончательно получим, что затухание спиновых волн за счет процессов слияния и рассеяния магнонов имеет вид

$$\begin{aligned} \text{Im} \sum (\vec{k}, i\omega_n) = & \Phi_1^2 \frac{a^3}{16\pi^2} \int_0^{p_d} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p^m}{2}\right) - \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p^m + \beta\varepsilon_k^m}{2}\right) \right] p^2 dp + \\ & + \Phi_1^2 \frac{a^3}{\pi^2} \int_0^{p_d} \left( 1 + \frac{1}{2} \left[ \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p^m}{2}\right) + \text{cth}\left(\frac{\beta\varepsilon_p^m + \beta\varepsilon_k^m}{2}\right) \right] \right) p^2 dp \end{aligned}$$

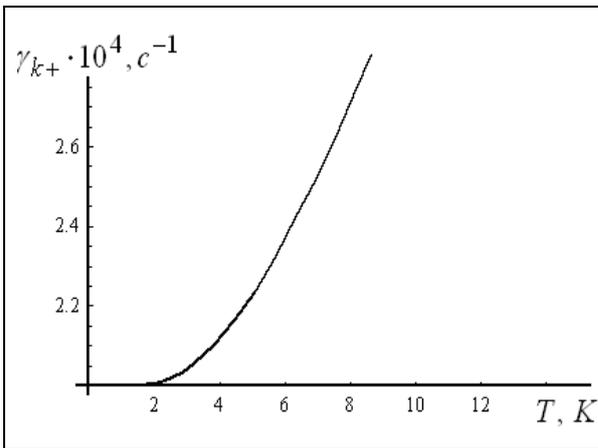


Рис. 1.15. Зависимость коэффициента затухания за счет процессов слияния магнонов от температуры

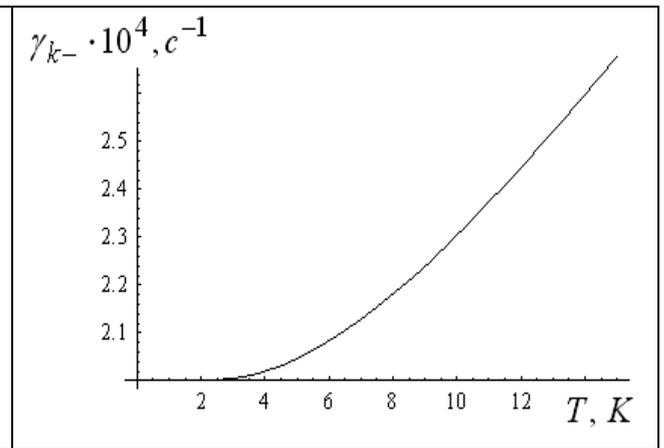


Рис. 1.16. Зависимость коэффициента затухания за счет процессов распада магнонов от температуры

Как видно из графиков на рис. 1.15 и 1.16, коэффициент затухания за счет процессов слияния магнонов возрастает с увеличением температуры по параболическому закону, рост коэффициента затухания за счет процессов распада магнонов с увеличением температуры происходит более медленно.

Численная оценка полученных выражений затухания длинноволновых магнонов для  $RbMnF_3$  в магнитном поле порядка 10 Э и при низких температурах дает  $\gamma_{k+} \approx \gamma_{k-} \approx 10^4 \text{ сек}^{-1}$ . При понижении температуры коэффициент затухания снижется, а при  $T \leq 2.5^\circ \text{ K}$  трехмагنونные процессы вообще запрещены. Результаты численных расчетов коэффициентов затухания приведены на рис. 1.15 и 1.16.

## § 6. Выводы к главе

В главе исследуется влияние внешних магнитного и электрического полей на магнитоэлектрическую подсистему орторомбического антиферромагнитного сегнетомагнетика. Среди множества различных типов магнитоупорядоченных материалов сегнетомагнетики составляют значительный класс, к которому относится целый ряд соединений и сплавов.

С учетом линейного по внешнему электрическому полю магнитоэлектрического эффекта, в главе определены, зависимости параметра магнитоэлектрического взаимодействия, а также спектр связанных сегнетомагнитных волн в орторомбических сегнетоантиферромагнетиках и антисегнетоантиферромагнетиках от приложенного внешнего магнитного и электрического полей.

Исследована зависимость энергетического спектра, спонтанной намагниченности и спиновой теплоемкости орторомбического сегнетомагнетика с двумя магнитными и двумя сегнетоэлектрическими подрешетками от внешних полей. На основе метода функций Грина и диаграммной техники получены температурные и полевые зависимости затухания спиновых волн. Методом теории возмущений и диаграммной техники для функции Грина определен вклад в свободную энергию для взаимодействующих магнонов, определено затухание магнонов, обусловленное процессами слияния и распада магнонов друг с другом, также рассмотрена их температурная и полевая зависимости.

## Глава 2. Магнитоэлектрическое взаимодействие в сверхрешетках. Моделирование фазовых переходов методами Монте-Карло

### §1. Введение

Последние два десятилетия очень высокими темпами развиваются исследования фазовых переходов, поверхностных эффектов и критических явлений в сверхрешетках или многослойных магнитных нанопленках (см. обзоры [4, 29, 208 - 210]). С развитием современных технологий появились возможности для создания сверхрешеток и синтеза многослойных нанопленок, толщиной в несколько атомных слоев из кристаллических структур как с магнитным так и сегнетоэлектрическим дальним порядком. Такие структуры способны проявлять сильный магнитоэлектрический эффект, который, как известно, является результатом взаимодействия между магнитной и сегнетоэлектрической подсистемами.

В работе [105, 106] было показано, что в гетероструктурах с магнитными и сегнетоэлектрическими слоями сильный магнитоэлектрический эффект, индуцированный внешним электрическим полем, наблюдается на границе раздела. Этот эффект сопровождается появлением антиферромагнитной фазы на интерфейсе ферромагнетика и сегнетоэлектрика, а также вызывает изменение критической температуры магнитного слоя. Экспериментально это наблюдали в сверхрешетке со стехиометрическим составом  $La_{0.87}Sr_{0.13}MnO_3/PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$  [218] при определенных концентрациях марганита. В работе [15] проведено моделирование методом Монте-Карло (МК) двухслойной пленки со структурой  $LaSrMnO/PbZrTiO$ . Ванг и соавторы [219] также с помощью моделирования методами Монте-Карло исследовали ферромагнитную сверхрешетку из двух слоев с изинговскими спинами  $S = 1/2$  на первом слое

и спинами  $S = 1$  на втором соответственно: результаты моделирования показали сильное влияние обменной связи и толщины слоя на магнитные свойства системы. В работе [221] с привлечением Монте-Карло моделирования построена фазовая диаграмма и исследованы магнитные свойства изинговских сегнетоэлектрических сверхрешеток с чередующимися слоями со спинами  $(1, 3/2)$ . Следует отметить, что авторы работы [221] исследовали сверхрешетку, состоящую только из двух сегнетоэлектрических слоев с антисегнетоэлектрическим межфазным взаимодействием между слоями в рамках поперечной модели Изинга. В работе обсуждается ряд интересных явлений, таких как наличие температуры компенсации или поперечного поля компенсации для определенных диапазонов значений обменных взаимодействий.

В данной главе исследуется влияние магнитоэлектрической связи на интерфейсе магнитных и сегнетоэлектрических слоев, а также внешних магнитного и электрического полей на термодинамические свойства сверхрешетки мультиферроика. Методология моделирования многослойных пленок Гейзенберга [208, 209] адаптирована для Монте-Карло моделирования и расчета магнитных свойств сверхрешетки мультиферроика. При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации, выполненные автором лично или в соавторстве, в которых согласно положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [103-105, 107, 210, 222]. Авторский вклад заключался в участии в постановке задач, выполнении исследования, написании программ для моделирования фазовых переходов и критических явлений, отладке программ для расчетов на суперкомпьютере, обсуждении результатов и подготовке статей в перечисленных публикациях.

## § 2. Модель и основное состояние

Рассмотрим многослойную пленку мультиферроика, состоящую из ферромагнитных слоев  $L_z^m$  и сегнетоэлектрических слоев  $L_z^f$ , чередующихся в направлении оси  $z$  (см. Рис. 2.1). Каждая плоскость  $xu$  имеет линейные латеральные размеры  $L \times L$ . Узлы решетки магнитных слоев этой сверхрешетки заполнены взаимодействующими спинами Гейзенберга  $\vec{S}_i$ , в то время как узлам решетки сегнетоэлектрических слоев присваиваются взаимодействующие поляризации  $\vec{P} = \pm 1$ , направленные перпендикулярно плоскости пленки. Сверхрешетка, таким образом, состоит из  $L \times L \times L_z$  узлов, где  $L_z = L_z^m + L_z^f$ . На систему накладываем периодические граничные условия в плоскости.

Гамильтониан сверхрешетки выберем в виде

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (2.1)$$

Первое слагаемое - гамильтониан магнитной подсистемы, второе - сегнетоэлектрической подсистемы, третий член - гамильтониан взаимодействия граничных магнитного и сегнетоэлектрических слоев.

Взаимодействие спинов внутри плоскости и между магнитными слоями зададим гамильтонианом Гейзенберга

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (2.2)$$

здесь  $J_{ij}^m > 0$  параметр обменного ферромагнитного взаимодействия между спином на  $i$  - м узле и его ближайшими соседями. Предполагаем, что обменное взаимодействие одинаково между ближайшими соседями как внутри слоя, так и между магнитными слоями.  $\vec{S}_i$  - классический Гейзенберговский спин на  $i$  - м узле.  $\vec{H}$  - напряженность внешнего магнитного поля, приложенного вдоль оси  $+z$ .

Для ферроэлектрических слоев запишем

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_i P_i^z \cdot E^z \quad (2.3)$$

здесь  $P_i^z$  поляризация, направленная вдоль оси  $z$  на  $i$ -м узле, будем считать, что она может принимать только 2 значения:  $\pm 1$ .  $J_{ij}^f > 0$  характеризует диполь – дипольное ферроэлектрическое взаимодействие между поляризацией на  $i$ -м узле и его ближайшими соседями.  $E^z > 0$  - напряженность внешнего  $+z$  перпендикулярна плоскости  $xу$  слоев.

Для моделирования магнитоэлектрического взаимодействия на границе магнитной и сегнетоэлектрической пленок, предположим, что поверхностный магнитный слой создает некоторое «эффективное» поле  $H(k)$ , направленное вдоль оси  $z$ , которое, в свою очередь, действует на поляризацию каждого узла  $k$  на поверхностном ферроэлектрическом слое. Напряженность такого «эффективного» поля можно записать в виде

$$H(k) = -J_{mf1} \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J_{mf2} \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.4)$$

В результате, на интерфейсе (поверхности) энергия магнитоэлектрического взаимодействия может быть записана в виде

$$H_{mf}(k) = H(k)P_k \quad (2.5)$$

Здесь принято, что  $J_{mf1}$  - параметр магнитоэлектрического взаимодействия между  $z$  – компонентой вектора поляризации  $\vec{P}_k$  поверхностного ферроэлектрического слоя и ближайшим спином на соседнем поверхностном магнитном слое,  $J_{mf2}$  – параметр взаимодействия между  $z$  – компонентой вектора поляризации  $\vec{P}_k$  поверхностного ферроэлектрического слоя и следующим за ближайшим спином на магнитной поверхности (см. Рис. 2.1).

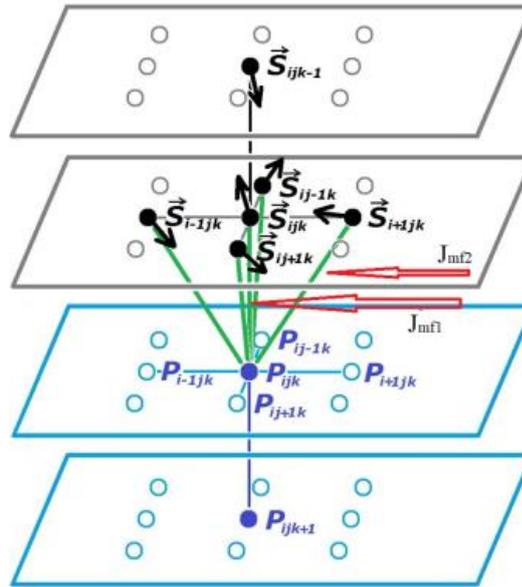


Рис. 2.1. Схематичное представление магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе между магнитными и ферроэлектрическими слоями.

Параметры обменных взаимодействий  $J_{ij}^m$  и  $J_{ij}^f$  выберем положительными, поэтому магнитные слои в основном состоянии ферромагнитны, ферроэлектрические слои имеют параллельные поляризации как внутри слоев, так и между слоями.

Относительная ориентация спинов между поверхностными магнитным и ферроэлектрическими слоями зависит от знаков магнитоэлектрического взаимодействия, то есть от знаков величин  $J_{mf1}$  и  $J_{mf2}$ . Проанализируем возможные ситуации. Два наиболее простых варианта реализуются, если: а) обе величины  $J_{mf1}$  и  $J_{mf2}$  положительны, тогда спины и вектора поляризации параллельны в основном состоянии, б) если оба параметра магнитоэлектрического взаимодействия отрицательны, то спины и вектора поляризации антипараллельны в основном состоянии на граничащих магнитном и сегнетоэлектрическом слоях.

Более сложная ситуация возникает, если параметры магнитоэлектрического взаимодействия имеют противоположные знаки. В этом случае возникает фрустрация, как результат конкуренции между  $J_{mf1}$  и  $J_{mf2}$ . К примеру,

если  $J_{mf1} > 0$ , а  $J_{mf2} < 0$  магнитоэлектрическое взаимодействие между ближайшими соседями имеет тенденцию расположить спины и вектора поляризации параллельно друг другу, в то время как магнитоэлектрическое взаимодействие между соседями, следующими за ближайшими стремится расположить их антипараллельно. В зависимости от соотношения между абсолютными величинами  $J_{mf1}$  и  $J_{mf2}$  реализуется один из этих случаев.

Энергия основного состояния спина на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрической пленки в отсутствии внешних магнитных и электрических полей имеет вид

$$E_1 = -Z_1 J^m - Z_2 J_{mf1} - Z_3 J_{mf2} \quad (2.6)$$

Например, для случая простой кубической решетки координационные числа равны  $Z_1 = 4, Z_2 = 1, Z_3 = 4$

Для простоты рассмотрим только те конфигурации, которые возможны при достаточно сильных внутриплоскостных обменных параметрах  $J_m > 0$ ,  $J_f > 0$  и  $J_{mf1} < 0$ . Тогда в отсутствии внешних магнитных и электрических полей, реализуются четыре спиновые конфигурации с энергиями  $E_1, E_2, E_3$  и  $E_4$  основного состояния спина на интерфейсе (Рис. 2.2), которые определяются соотношениями

$$E_1 = -Z_1 J^m - Z_2 |J_{mf1}| - Z_3 |J_{mf2}| \quad (2.7)$$

$$E_2 = -Z_1 J^m + Z_2 |J_{mf1}| - Z_3 J_{mf2} \quad (2.8)$$

$$E_3 = -Z_1 J^m - Z_2 |J_{mf1}| + Z_3 J_{mf2} \quad (2.9)$$

$$E_4 = Z_1 J^m - Z_2 |J_{mf1}| - Z_3 J_{mf2} \quad (2.10)$$

Первое состояние реализуется, если  $E_1 < E_2, E_1 < E_3, E_1 < E_4$ , то есть при

$$\begin{aligned} & J_{mf2} < 0 \\ & |J_{mf1}| < \frac{Z_1 J^m - Z_3 J_{mf2}}{Z_2} \\ & |J_{mf1}| > 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

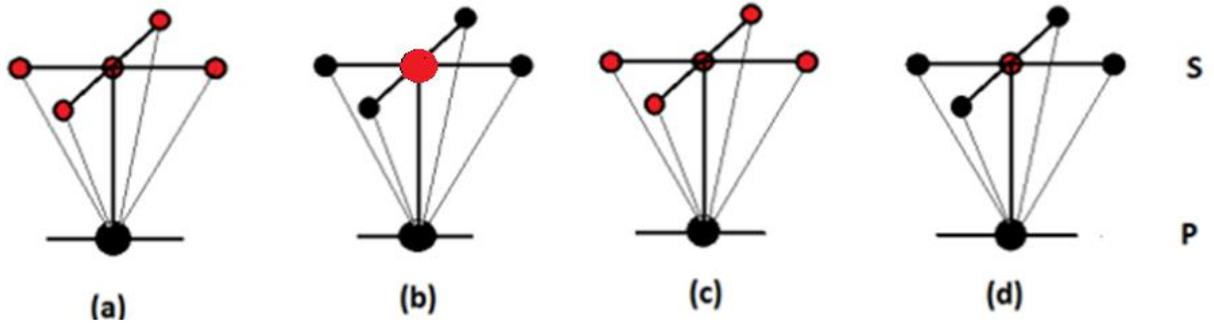


Рис. 2.2. Спиновые конфигурации основного состояния с энергиями от  $E_1$  до  $E_4$  ((a) – (d) соответственно), которые зависят от поверхностных взаимодействий между магнитными и сегнетоэлектрическими слоями. Черные кружки в нижнем ряду это  $P_i^z = 1$  (вверх), верхние черные кружки это спины, направленные вверх, красные кружки - спины, направленные вниз

Если  $J_{mf2} > 0$ , то возможна следующая конфигурация основного состояния. Критические значения для  $J_{mf2}$  и  $J_{mf1}$  определяются соотношениями

$$\begin{aligned}
 J_{mf2} &> 0, \\
 J_{mf1} &< \frac{Z_3 J_{mf2}}{Z_2}, \\
 |J_{mf1}| &< \frac{Z_1 J_m}{Z_2}
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

Если значение  $J_{mf2} > 0$ , и оно превышает  $J_{mf1}$  то реализуется третья конфигурация основного состояния. Критические значения для  $J_{mf2}$  и  $J_{mf1}$  определяются условиями

$$\begin{aligned}
 |J_{mf1}| &> 0 \\
 J_{mf2} &> \frac{Z_2 |J_{mf1}|}{Z_3} \\
 J_{mf2} &< \frac{Z_1 J_m}{Z_3}
 \end{aligned}
 \tag{2.13}$$

При моделировании методом Монте-Карло, в зависимости от выбираемых значений параметров взаимодействий, задаем в качестве начальных условий полученные конфигурации основного состояния. Это позволяет избежать

попадания в метастабильные состояния при расчетах в области низких температур. В дальнейших расчетах выбираем  $J_{mf1} < 0$ , то есть будем считать, что в основном состоянии спины выстраиваются антипараллельно приложенному внешнему магнитному полю в направлении  $+z$ . Поэтому магнитная подсистема подвергается фазовому переходу при возрастании температуры в определенной области значений критического поля.

### §3. Моделирование методом Монте - Карло

Для моделирования методом Монте-Карло в работе используется алгоритм Метрополиса. Решетка обладает линейными размерами  $L \times L \times L_z$ , где  $L$  варьируется в диапазоне  $L = 40, 60, 80, 100$  для выявления размерных эффектов. Толщина сверхрешетки в численных расчетах принимается равной  $L_z = 8, 16, 12, 24$ . При исследовании влияния магнитоэлектрической связи на магнитные, сегнетоэлектрические и поверхностные свойства, для простоты выбрали одинаковые линейные размеры и толщины для сегнетоэлектрического и магнитного слоев. (К примеру, если  $L_z = 8$  – имеется ввиду, что рассматривается  $L_z^m = 4$  магнитных слоя и  $L_z^f = 4$  сегнетоэлектрических слоя). При моделировании параметры обменных взаимодействий в магнитных и ферроэлектрических слоях принимались равными  $J^m = J^f = 1$ . Для моделирования методом Монте-Карло иницируется процедура охлаждения из неупорядоченной фазы, для этого электрические поляризации  $P_i^z = \pm 1$  случайным образом распределяются по узлам решетки в сегнетоэлектрических слоях, по направлению оси  $z$ . В ферромагнитных слоях спины  $|\vec{S}_i| = 1$  также случайным образом равномерно распределяются по узлам решетки, в произвольных направлениях. При каждом задаваемом температурном шаге  $T$ , присваиваются новые случайные значения  $\vec{S}_i$  и  $P_i^z$  на узлах и вычисляется разность энергии, вызванная этим изменением. Новые значения спинов и поляризаций принимаются либо отбрасываются, согласно алгоритму Метрополиса. Для того, чтобы обеспечить сходимость результатов компьютерных расчетов, процедура перебора параметров  $\vec{S}_i$  и  $P_i^z$  на каждом узле решетки выполняется 100000 раз. Данная процедура рассматривается как одна Монте –Карло итерация или Монте-Карло шаг и принимается в качестве переменной времени в вычислениях. Средние значения термодинамических величин, таких как поляризация каждого сегнетоэлектрического слоя  $P(n)$ , общая поляризация сегнетоэлектрической подсистемы  $P$ , намагниченность каждого магнитного слоя  $M(n)$  и общая

намагниченность магнитной подсистемы  $M$  рассчитываются в течении 50000 шагов Монте-Карло. Поляризация сегнетоэлектрического слоя и намагниченность магнитного слоя вычисляются по формулам:

$$P(n) = \frac{1}{L^2} \left\langle \left| \sum_{i \in n} P_i \right| \right\rangle \quad (2.14)$$

$$M(m) = \frac{1}{L^2} \left\langle \left| \sum_{j \in m} \vec{S}_j \right| \right\rangle \quad (2.15)$$

где  $\langle \dots \rangle$  - термодинамическое среднее, суммирования по индексам  $i$  и  $j$  выполняются по узлам решетки сегнетоэлектрической подсистемы  $n$  и по узлам решетки магнитной подсистемы  $m$ , соответственно. Процедура заполнения узлов сверхрешетки и моделирование нагрева решетки, то есть вывод системы из состояния равновесия, осуществляется начиная с различных конфигурации основного состояния, вычисленных выше.

На рис. 2.3 представлены результаты Монте-Карло моделирования для энергии, намагниченности, поляризации и восприимчивостей магнитной и сегнетоэлектрической подсистем, полученных при «нагревании» рассматриваемой системы от начальной конфигурации основного состояния, соответствующей условиям (2.11). Конечно, если исходить из произвольных конфигурации спинов и компонент векторов поляризации, которые не являются конфигурацией основного состояния, система также достигнет такого же состояния термодинамического равновесия, но время необходимое для этого значительно увеличивается, особенно долго происходят вычисления в области низких температур.

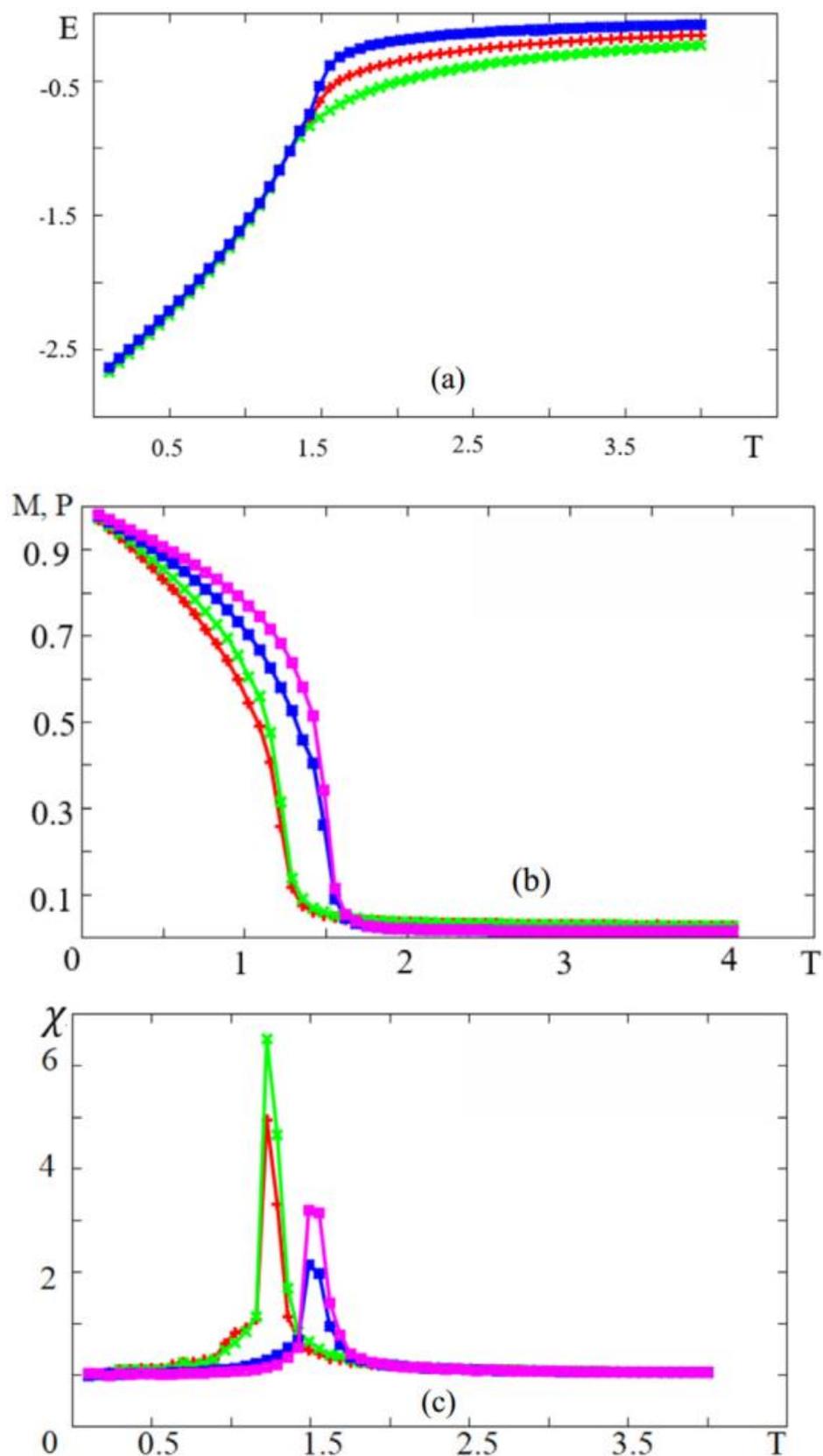
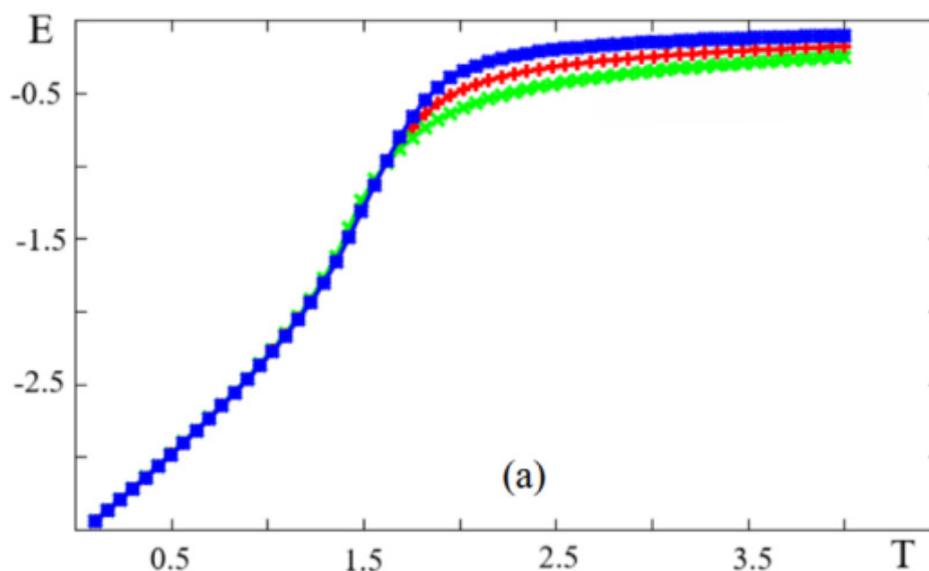


Рис. 2.3: (a) Зависимость энергии от температуры  $T$ . Красный цвет: общая внутренняя энергия сверхрешетки, зеленый цвет: внутренняя энергия магнитной подсистемы, линия синего цвета: внутренняя энергия ферроэлектрической

подсистемы; (b) Зависимость намагниченности и поляризации от  $T$ . Красный цвет: поверхностная намагниченность (намагниченность поверхностного слоя), зеленый цвет: намагниченность внутренних магнитных слоев, синий цвет: поверхностная поляризация (поляризация поверхностного слоя), фиолетовый цвет: поляризация внутренних ферроэлектрических слоев; (c) Зависимость восприимчивости от температуры  $T$ , с тем же обозначениями цветов.  $J^m = 1$ ,  $J_{mf1} = -0.15$ ,  $J_{mf2} = -0.135$ , соответствует основному состоянию с энергией спина  $E_1$ .

Результаты Монте-Карло моделирования для энергии, намагниченности, поляризации и восприимчивостей магнитной и сегнетоэлектрической подсистем, полученных при «нагревании» рассматриваемой системы от начальной конфигурации основного состояния, соответствующей энергии  $E_2$  и условиям (2.12) показаны на рис. 2.4.



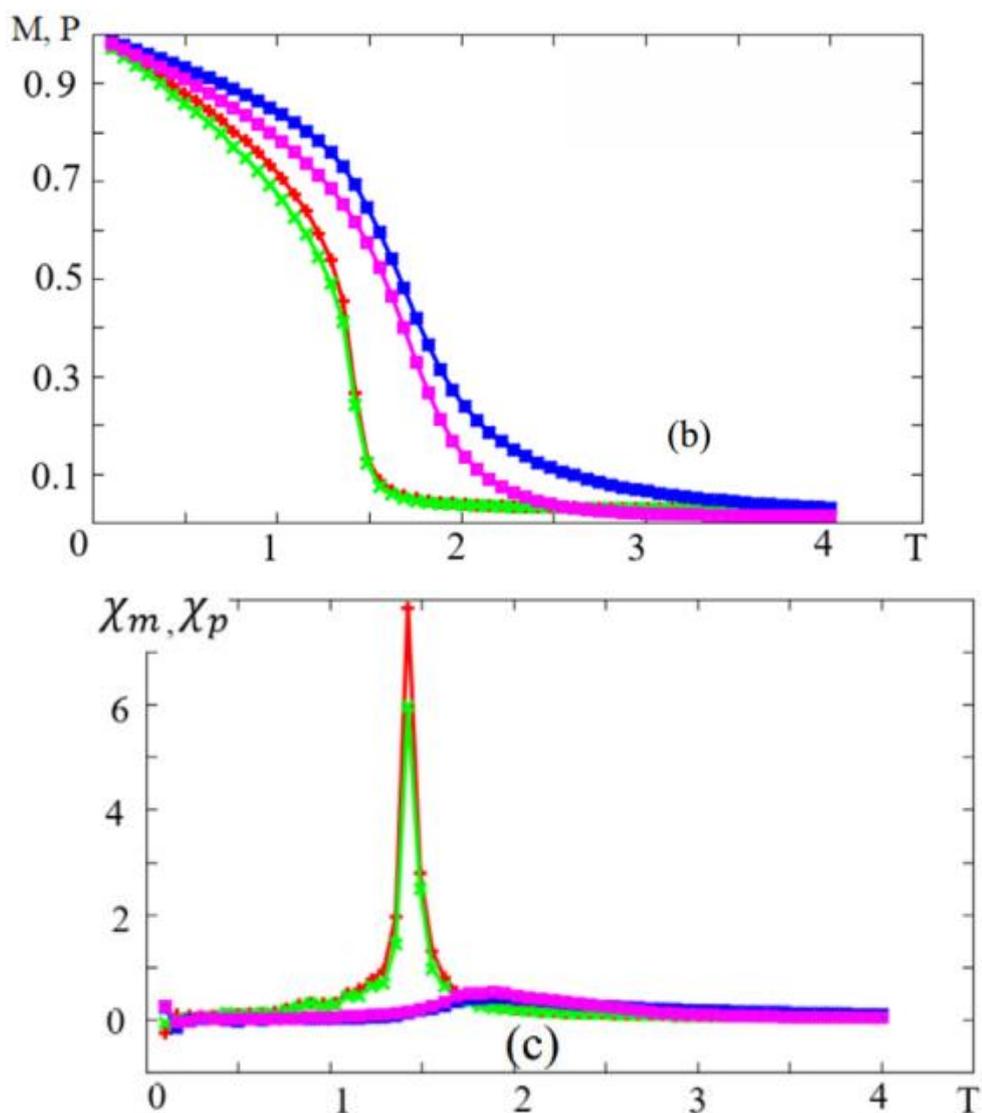


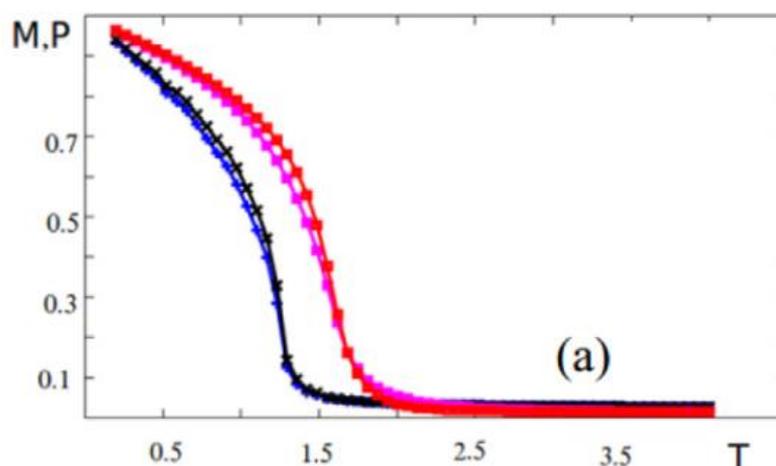
Рис. 2.4: (а) Зависимость энергии от температуры  $T$ . Красный цвет: общая внутренняя энергия сверхрешетки, зеленый цвет: внутренняя энергия магнитной подсистемы, линия синего цвета: внутренняя энергия ферроэлектрической подсистемы; (б) Зависимость намагниченности и поляризации от  $T$ . Красный цвет: поверхностная намагниченность (намагниченность поверхностного слоя), зеленый цвет: намагниченность внутренних магнитных слоев, синий цвет: поверхностная поляризация (поляризация поверхностного слоя), фиолетовый цвет: поляризация внутренних ферроэлектрических слоев; (с) Зависимость восприимчивости от температуры  $T$ , с тем же обозначениями цветов.  $J^m = 1$ ,  $J_{mf1} = -0.15$ ,  $J_{mf2} = 0.8$ , соответствует основному состоянию с энергией спина  $E_2$ .

Для начальной конфигурации основного состояния  $E_3$ , соответствующей условиям (2.13), результаты качественно не отличаются.

Полученные результаты показывают, что в температурной зависимости энергии и других физических величин при низких температурах отсутствуют области метастабильности. Это является результатом того, что был сделан корректный выбор начальной конфигурации основного состояния, в соответствии с используемыми в расчетах параметрами магнитоэлектрических взаимодействий между интерфейсами. Отметим, что в сегнетоэлектрической подсистеме фазовый переход происходит при температуре выше, чем у магнитной подсистемы. Это связано с изинговской природой сегнетоэлектрических поляризований (в 3d моделях температура перехода обратно пропорциональна компонентам спина  $\sim 1/N$  [21]). Кроме того, как видно из представленных графиков поверхностные (интерфейсные) слои имеют немного меньший параметр порядка, чем параметры порядка внутри пленок.

### 3.1. $S - S - P$ - модель магнитоэлектрического взаимодействия

Рассмотрим важный частный случай, когда  $J_{mf1} = J_{mf2}$ . На Рис. 2.5. представлены температурные зависимости намагниченности, поляризации и восприимчивостей различных слоев магнитной и сегнетоэлектрической подсистем для следующих значений параметров:  $J^m = J^f = 1$ ,  $J_{mf} = J_{mf1} = J_{mf2} = -0.15, -0.55$ .



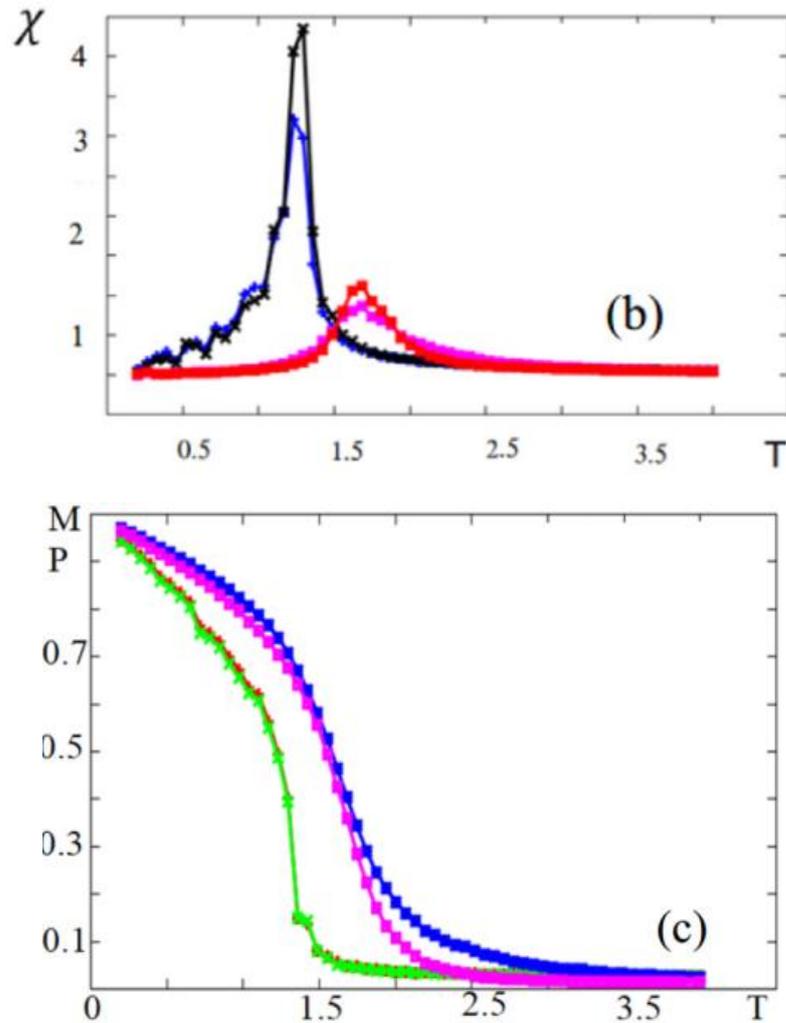


Рис. 2.5: (a) Зависимость намагниченности и поляризации от  $T$  (b) зависимость восприимчивости слоев сверхрешетки от  $T$ , для  $J^m = J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -0.15$ ,  $H^z = E^z = 0$ ,  $L = 40$ ,  $L^z = 8$ . Синий цвет для интерфейсных магнитных слоев, черный цвет – для внутренних магнитных слоев, фиолетовый цвет для интерфейсных сегнетоэлектрических слоев, красный для внутренних ферроэлектрических слоев, соответственно.  $J_{mf1} = J_{mf2}$ ; (c) Зависимость намагниченности и поляризации от  $T$  в случае  $J^m = J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -0.55$ ,  $H^z = E^z = 0$ ,  $|\vec{S}| = 1$ ,  $P = \pm 1$ . Красный цвет для интерфейсных магнитных слоев, зеленый цвет – для внутренних магнитных слоев, фиолетовый цвет для интерфейсных сегнетоэлектрических слоев, синий для внутренних ферроэлектрических слоев.

Для  $J_{mf} = -0.15$  можно заметить резкие переходы второго рода при  $T_c^m \cong 1.32$  для магнитных слоев и  $T_c^f \cong 1.84$  для ферроэлектрических.

Результаты для параметров порядка в случае действующего внешнего магнитного поля с напряженностью  $H^z = 0.7$  показаны на рис. 2.6. Как видно из данного графика, в этом случае магнитная подсистема не подвержена фазовому переходу аналогично ферромагнетику во внешнем поле. Ферроэлектрическая подсистема напротив, испытывает фазовый переход второго рода при  $T_c \cong 1.84$ .

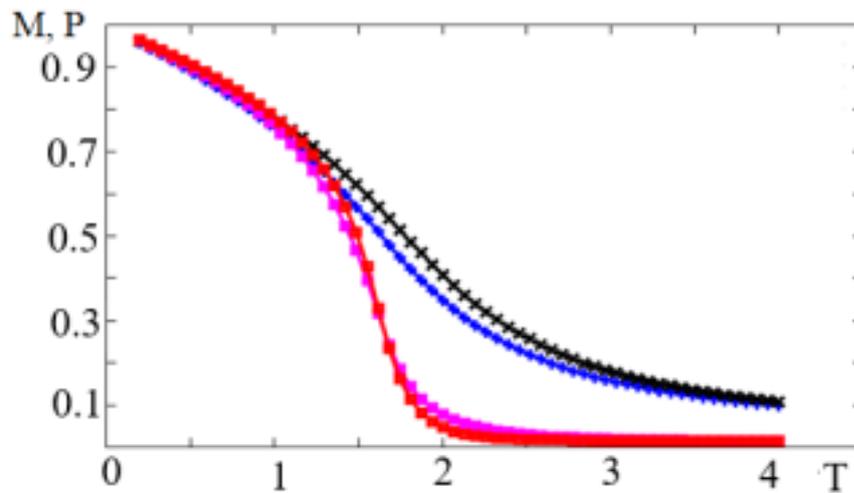


Рис. 2.6: Зависимость намагниченности и поляризации от  $T$  для параметров  $J^m = J^f = 1$ ,  $J_{mf}(= J_{mf1} = J_{mf2}) = -0.15$ ,  $H^z = 0.7$ , and  $E^z = 0, L = 40, L^z = 8$ . Синий цвет для интерфейсных магнитных слоев, черный цвет – для внутренних магнитных слоев, фиолетовый цвет для интерфейсных сегнетоэлектрических слоев, красный для внутренних ферроэлектрических слоев.

С увеличением величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J_{mf}$  на интерфейсе характер фазовых переходов в обеих подсистемах меняется, при малых значениях  $J_{mf}$  обе подсистемы подвергаются фазовому переходу второго рода, при увеличении  $J_{mf}$  обе подсистемы испытывают фазовый переход первого рода. На рис. 2.7 показаны зависимости от темпера-

туры намагниченности и восприимчивости магнитной подсистемы для различных значений  $J_{mf}$  в области изменения типа фазовых переходов в магнитной системе.

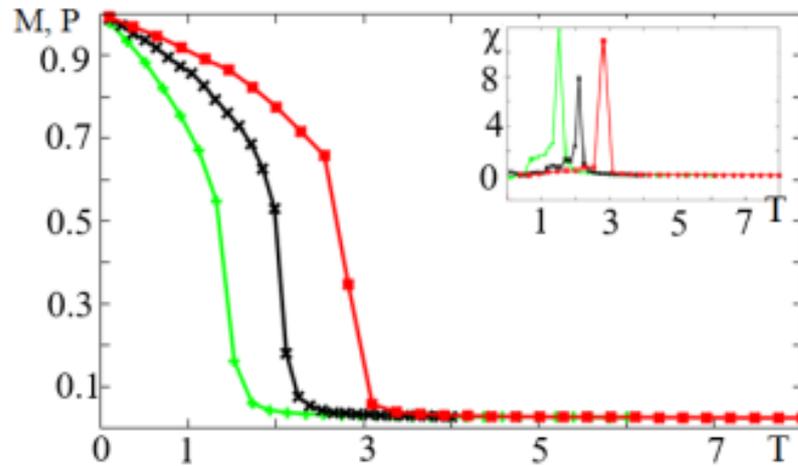


Рис. 2.7. Зависимости от температуры намагниченности и восприимчивости магнитной подсистемы в случае  $J^m = J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -1, -3, -5.5$ ,  $H^z = E^z = 0$ ,  $L = 40, L^z = 8$ . Красный цвет соответствует  $J_{mf} = -3.5$ , черный цвет  $J_{mf} = -2.5$ , зеленый цвет  $J_{mf} = -1$ .

Система испытывает фазовые переходы второго рода как в магнитной так и в сегнетоэлектрической подсистеме уже при  $J_{mf} = 0$ . Критическая температура для магнитной системы равно  $T_C = 2.456$  при  $J_{mf} = 0$ . При увеличении параметра магнитоэлектрического взаимодействия критическая температура уменьшается.

На рис. 2.8 показаны графики для  $J_{mf} = -9.5$ , происходит сильный фазовый переход первого рода при  $T_C \cong 3.45$  для магнитного слоя на интерфейсе и при  $T_C \cong 3.49$  для интерфейсного сегнетоэлектрического слоя. Только интерфейсные слои подвергаются фазовому переходу первого рода, в силу того, что только параметры порядка интерфейсных слоев резко уменьшаются при достижении температуры перехода. Построена зависимость температуры перехода от параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J_{mf}$ ,

критическая температура соответствовала максимальному значению восприимчивости магнитной  $\chi_m(T)$  и сегнетоэлектрической  $\chi_f(T)$  пленки на графиках  $\chi_m(T)$  и  $\chi_f(T)$ .

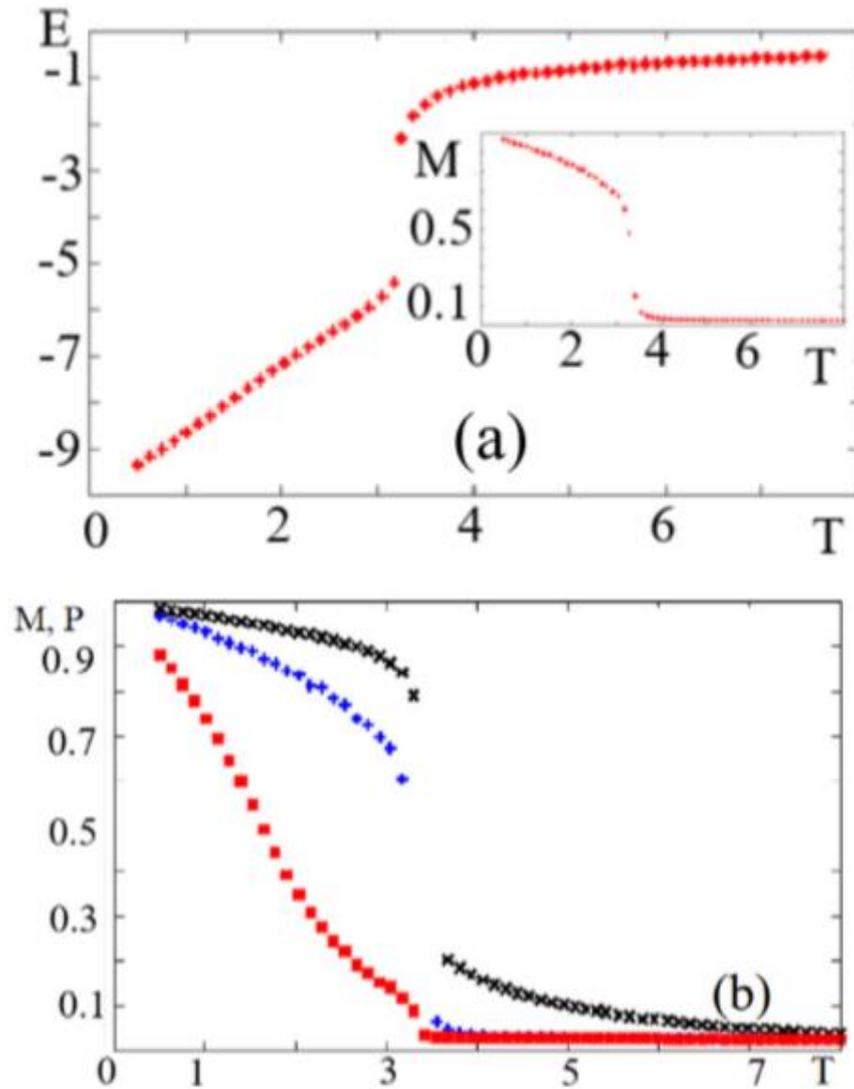


Рис. 2.8: (а) Зависимость энергии, и намагниченности интерфейсного слоя (вставка) от  $T$ ; (б) Намагниченность интерфейса (голубой цвет), намагниченность внутренних слоев (красный цвет), поляризация интерфейса (черный цвет) и поляризация (фиолетовый цвет – совпадает с красной кривой), от  $T$ .  $J^m = 1, J^f = 1, J_{mf} = -9.5, H^z = E^z = 0, L = 40, L^z = 8$ .

Следует отметить, что для большого значения магнитоэлектрического взаимодействия  $J_{mf}$  на поверхностных слоях обеих пленок формируется сильное упорядочение (черная и голубая кривая на рис. 2.8 б), действие

которого на внутренние слои аналогично воздействию внешнего поля, которое не позволяет обнулиться параметру порядка внутренних слоев. В результате этого для внутренних слоев характерно только слабое и незначительное искажение хода кривой зависимости параметра порядка от  $T$  при  $T_C \cong 1.5$ . Параметры порядка внутренних магнитных и сегнетоэлектрических слоев принимают нулевые значения только при  $T_C \cong 3.45$  (красная кривая на рис. 8b), то есть, при температуре фазового перехода первого рода. Значение температуры перехода совпадает для поверхностных слоев обеих подсистем.

На рис. 2.9 представлена фазовая диаграмма в координатах  $T_C - J_{mf}$ . Значения критических температур рассчитывались по пикам магнитной и ферроэлектрической восприимчивостей.

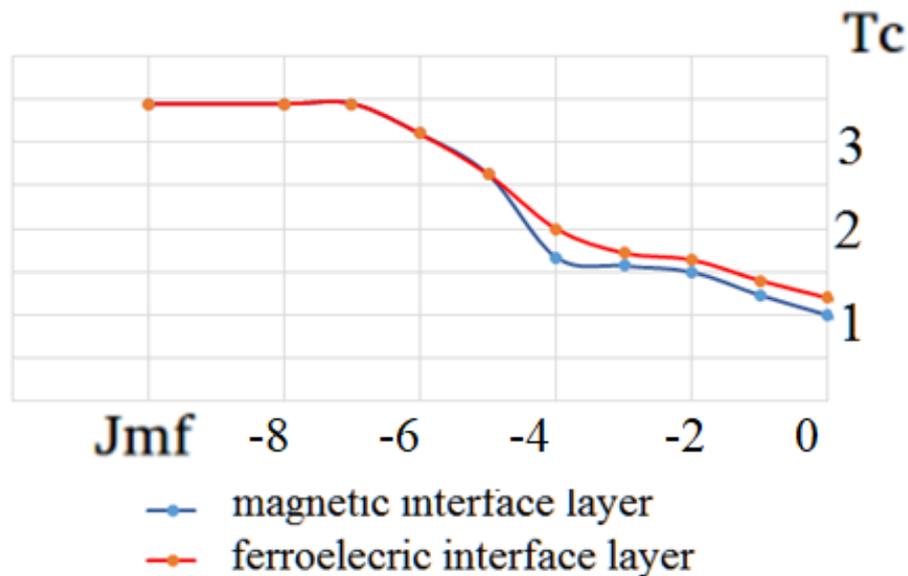


Рис. 2.9: Фазовая диаграмма в координатах  $T - J_{mf}$ . Здесь  $J^m = 1, J^f = 1, H^z = E^z = 0$

Фазовая диаграмма показывает, что температура перехода увеличивается при увеличении параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $|J_{mf}|$  на интерфейсе. Фазовый переход второго рода в сверхрешетке происходит в диапазоне значений от  $J_{mf} = 0$  до  $J_{mf} = -5.5$ . При  $J_{mf} = -5.2$  и выше фазовые переходы в обеих пленках происходят уже при одинаковой температуре.  $T_C$  максимально при  $J_{mf} = -7.0$ . Фазовые переходы второго рода в системе

начинают происходить при  $J_{mf} = 0$ . Фазовые переходы в сверхрешетке становятся переходами первого рода при  $J_{mf} = -7$  (см. Рис. 2.8 для  $J_{mf} = -9.5$ ).

#### § 4. $P - P - S$ -модель магнитоэлектрического взаимодействия

Зададим магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрической пленки следующим образом

$$H_{mf}^1 = -J_{mf} \sum_{i,j,k} P_i P_j S_k \quad (2.14)$$

Покажем некоторые результаты для  $P - P - S$  - модели. На рисунке 10 показаны графики зависимостей намагниченностей и поляризаций слоев в зависимости от температуры и для различных значений магнитоэлектрического взаимодействия (2.14). При малых величинах параметра магнитоэлектрического взаимодействия магнитные и сегнетоэлектрические пленки испытывают фазовые переходы разного рода: магнитные слои испытывают фазовые переходы первого рода при температуре  $T_C \approx 0.63$ , тогда как сегнетоэлектрические слои подвержены фазовому переходу второго рода при температуре  $T_C \approx 1.52$ .

С ростом величины магнитоэлектрического взаимодействия  $J_{mf}$  происходит необычное явление: на интерфейсных слоях при величинах  $J_{mf} < -3.5$  происходят фазовые переходы первого рода. Отметим, что в  $S - S - P$  - модели (2.5), рассмотренной в начале данной главы, подобное явление наблюдалось при  $J_{mf} < -7.0$ . Этот кросс-овер переходов можно наблюдать на рис. 2.10а для магнитной пленки и на вставке к этому рисунку для сегнетоэлектрической пленки.

Для внутренних слоев магнитной пленки, при росте параметра  $J_{mf}$  также происходит переключение типа фазовых превращений (Рис. 2.10 (b)).

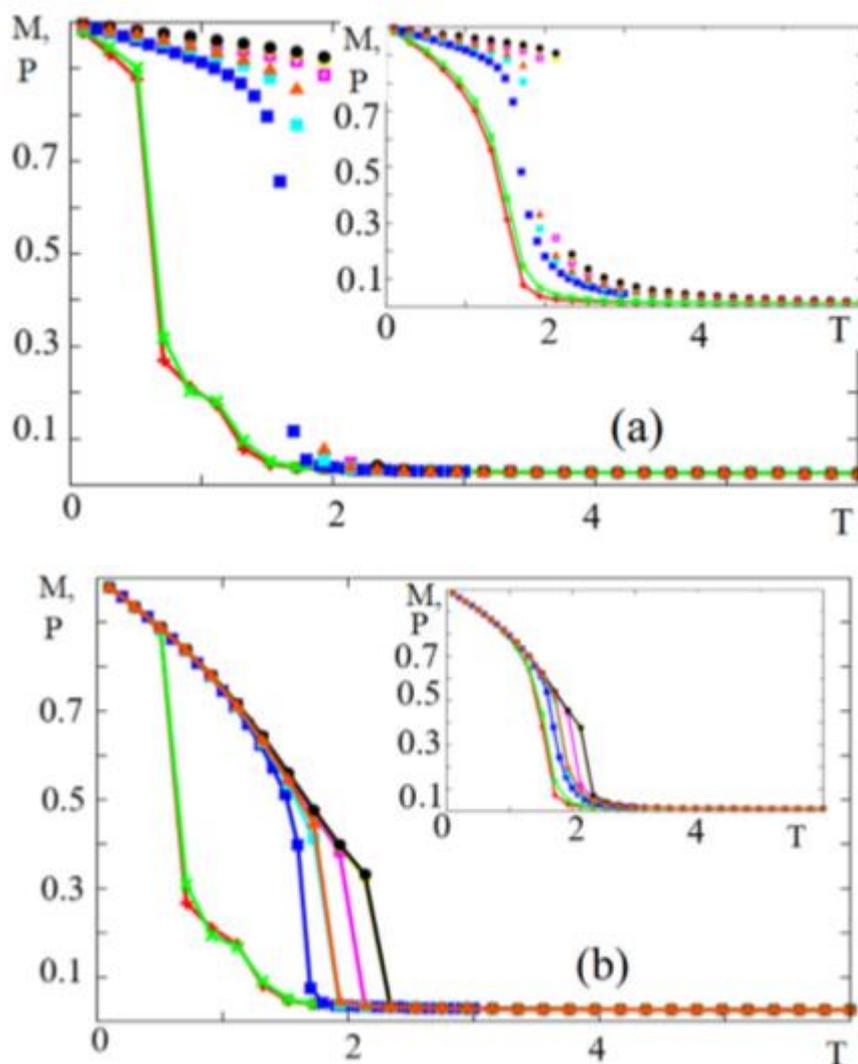


Рис. 2.10. (а) Температурная зависимость интерфейсных слоев магнитной и сегнетоэлектрической (вставка) пленки. Здесь  $J^m = J^f = 1, H^z = E^z = 0$ . Красный цвет соответствует  $J^{mf} = -0.25$ , зеленый цвет  $-J^{mf} = -0.5$ . Синий -  $J^{mf} = -2.5$ , голубой цвет-  $J^{mf} = -3.5$ , черный цвет -  $J^{mf} = -7.0$ . (б) Температурная зависимость внутренних слоев магнитной и сегнетоэлектрической (вставка) пленки. Цвета соответствуют тем же самым параметрам  $J^{mf}$  что и для верхнего рисунка.

Фазовая диаграмма на рис. 2.11а демонстрирует влияние  $J_{mf}$  на температуру переходов, происходящих на интерфейсных магнитном и сегнетоэлектрических слоях сверхрешетки.

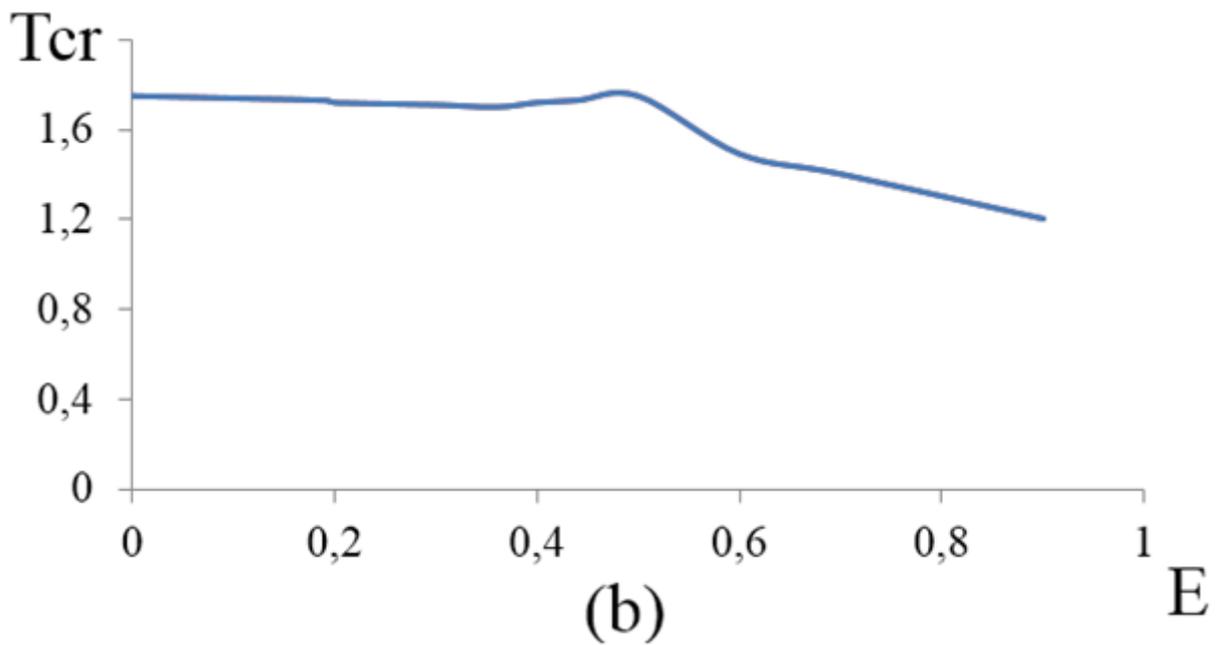
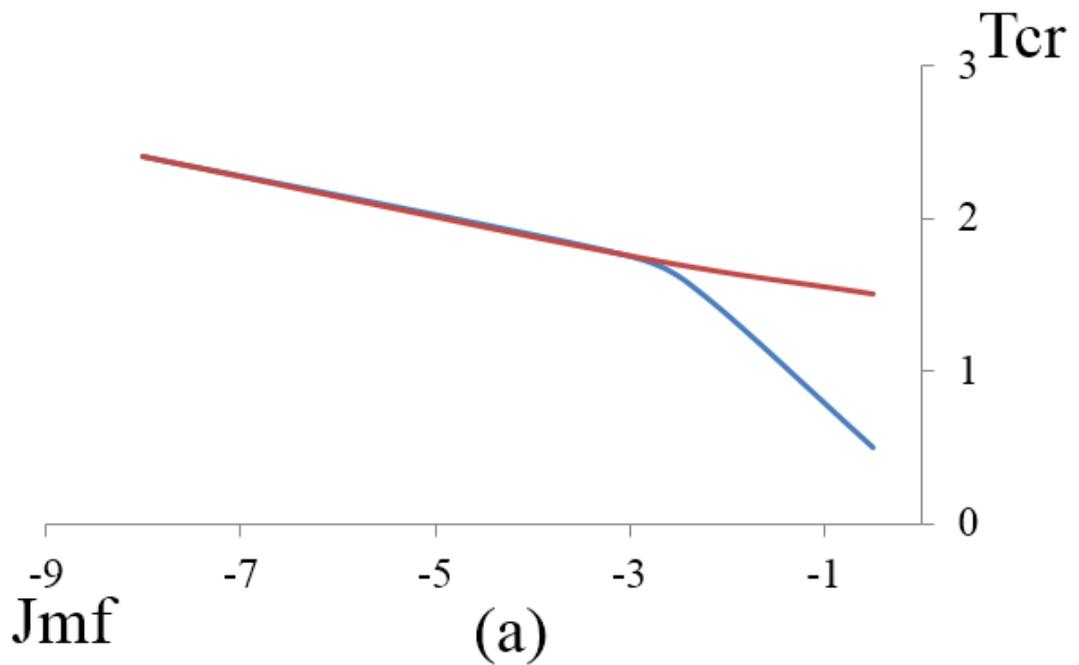


Рис. 2.11 (а). Фазовая диаграмма в координатах  $T - J_{mf}$ . Для параметров  $J^m = J^f = 1, H^z = E^z = 0$ . Красный и черные цвета соответствуют сегнетоэлектрической и магнитной критическим температурам. (б) Фазовая диаграмма в координатах  $T - E \equiv E^z$ . Параметры:  $J^m = J^f = 1, H^z = 0, J_{mf} = -3.5$ .

Видно, что критическая температура увеличивается с возрастанием абсолютного значения  $J_{mf}$ . При  $J_{mf} = -3.0$  и ниже температуры переходов

для магнитной и сегнетоэлектрической пленки совпадают. Фазовая диаграмма, показанная на рис. 2.11 (b) демонстрирует влияние внешнего электрического поля  $E$  на температуры переходов в различных подсистемах сверхрешетки. Как видно из фазовой диаграммы, температура перехода практически неизменна в диапазоне значений  $E \in (0, 0.5)$ . Для больших значений  $|J_{mf}|$  ( $J_{mf} \ll -3$ ) температура перехода неизменна при воздействии внешнего электрического поля.

Рис. 2.12 демонстрирует конкуренцию между магнитоэлектрическим взаимодействием и внешним электрическим полем.

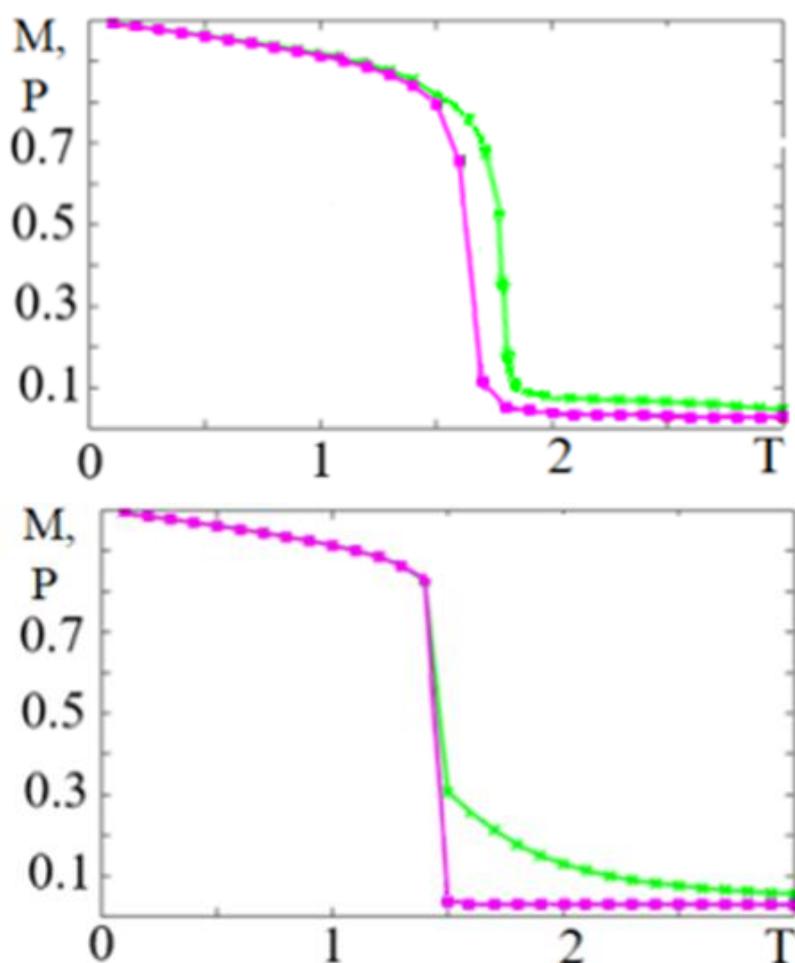


Рис. 2.12. Зависимость намагниченности и поляризации интерфейсного слоя от  $T$ ;  $J^m = 1, J^f = 1, J_{mf} = -2.5, H^z = 0, E^z = 0$  (верхний рис.) и  $E^z = 0.5$  (нижний рисунок). Фиолетовый цвет для интерфейсных магнитных слоев, зеленый цвет – для интерфейсных сегнетоэлектрических слоев.

При умеренном магнитоэлектрическом взаимодействии  $J_{mf} = -2.5$  в интерфейсном сегнетоэлектрическом и магнитном слое происходит фазовый переход второго рода при  $T_C = 1.77$  и  $T_C = 1.64$  соответственно. В случае действия внешнего электрического поля, направленного перпендикулярно плоскости сверхрешетки, магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе «конкурирует» с внешним электрическим полем. Если включить внешнее электрическое поле, в обеих подсистемах происходят фазовые переходы первого рода при одинаковой температуре  $T_C = 1.50$ .

В отсутствии внешнего электрического поля при сильном магнитоэлектрическом взаимодействии ( $J_{mf} = -3.5$ ) на поверхностных слоях и магнитной и сегнетоэлектрических подсистемах происходит фазовый переход первого рода при температуре  $T_C \cong 3.45$  (Рис. 2.13 (верхний)).

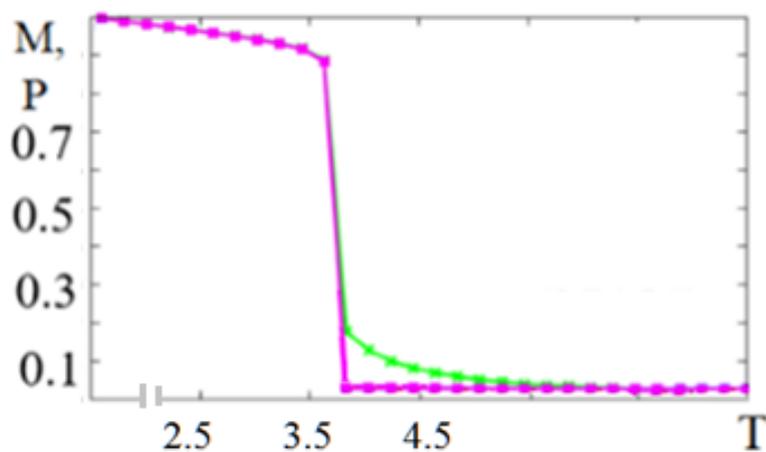
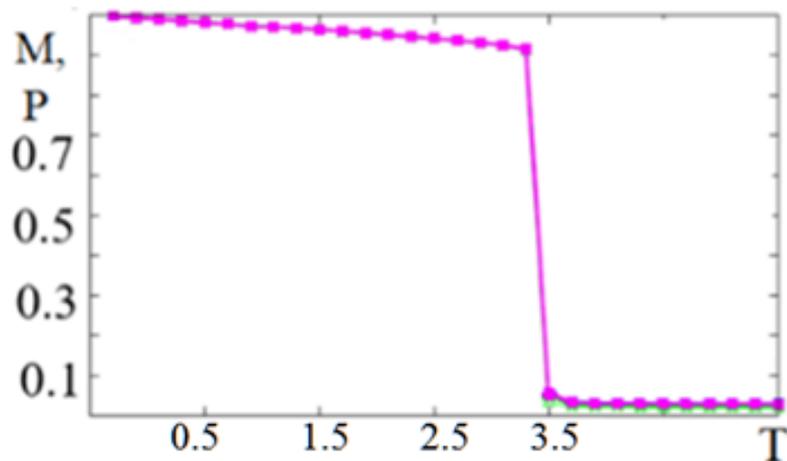


Рис. 2.13. Зависимость намагниченности и поляризации интерфейсного слоя от  $T$ ;  $J^m = 1, J^f = 1, J_{mf} = -3.5, H^z = 0, E^z = 0$  (верхний рисунок) и  $E^z = 0.5$  (нижний рисунок). Фиолетовый цвет для интерфейсных магнитных слоев, зеленый цвет – для интерфейсных сегнетоэлектрических слоев.

Если теперь подействовать умеренным внешним электрическим полем ( $E^z = 0.5$ ), то тип фазовых переходов в системе не меняется, но температура перехода для обеих подсистем увеличивается до  $T_c = 3.75$  и остается по прежнему одинаковой для обеих подсистем (Рис. 2.10 (нижний)).

Помимо модели коллинеарного взаимодействия интерфейсов, рассмотренной в нашей работе, магнитоэлектрического взаимодействие на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрической подсистем в форме Дзялошинского-Мории  $J_{mf} \vec{P}_k \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)$  может вызывать неожиданные явления на магнито-сегнетоэлектрической поверхности [173, 171].

## § 5. Исследование температурных зависимостей намагниченности и поляризации в приближении теории среднего поля

Приведем некоторые аналитические результаты, подтверждающие результаты численного моделирования. Для этого воспользуемся приближением теории среднего поля к гамильтониану

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (2.15)$$

где магнитоэлектрическое взаимодействие выбираем в виде простой  $S - S - P$  – модели в приближении взаимодействующих ближайших соседей на интерфейсе сверхрешетки из магнитной и сегнетоэлектрической пленок

$$H_{mf} = -J_{mf} \sum_{i,j,k} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j P_k \quad (2.16)$$

Рассмотрим спин на  $i$  – м узле поверхностного слоя магнитной пленки. Локальное поле, действующее на спин  $i$  – го узла со стороны окружающих его ближайших спинов и поляризации поверхностного сегнетоэлектрического слоя определяется выражением

$$H_i = -J^m \sum_{\vec{p}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+p} - \vec{H} \cdot \vec{S}_i - \frac{J_{mf}}{2} \delta_{i,4} P_{i+1} \sum_{\vec{p}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+p} \quad (2.17)$$

Локальное поле, действующее на поляризацию  $l$  – го узла со стороны окружающих ближайших соседних векторов поляризации и спинов поверхностного магнитного слоя имеет вид

$$H_l = -J^f \sum_{\vec{p}} \vec{P}_l \cdot \vec{P}_{l+p} - E^z \cdot \vec{P}_l - \frac{J_{mf}}{2} \delta_{l,5} \sum_{\vec{p}} P_l \vec{S}_{l-1} \cdot \vec{S}_{l+1+p} \quad (2.18)$$

или для удобства можем записать как

$$H_i = -\vec{H} S_i^z \quad (2.19)$$

$$H_l = -\vec{H}_2 P_l \quad (2.20)$$

здесь принято, что

$$\vec{H} = \xi_i (\langle S_z \rangle + \langle \Delta S_z \rangle) + H^z \quad (2.21)$$

$$\bar{H}_2 = J^f C_3 (\langle P_z \rangle + \langle \Delta P_z \rangle) - \frac{J_{mf}}{2} \delta_{l,5} C_2 S_{l-1}^z (\langle S_z \rangle + \langle \Delta S_z \rangle) + E^z \quad (2.22)$$

$$\xi_i = J^m C_1 - \frac{J_{mf}}{2} \delta_{i,4} C_2 P_{i+1} \quad (2.23)$$

для удобства записи введено обозначение  $P_z$  вместо  $P$ .

Выберем ось  $z$  в качестве оси квантования. Тогда средние значения  $x$  – и  $y$  – компонент вектора спина можем считать равными нулю, так как спины прецессируют вокруг оси  $z$ .

$$\langle S_{i+p}^x \rangle = \langle S_{i+p}^y \rangle = \langle S_{l-1+p}^x \rangle = \langle S_{l-1+p}^y \rangle = 0 \quad (2.24)$$

Соответственно, среднее значение  $z$  – компонент можно вычислить согласно определению статистического среднего, определяемого каноническим распределением

$$\langle S^z \rangle + \langle \Delta S^z \rangle = \frac{\sum_{S_i^z=-S}^S S_i^z \exp(-\beta H_i)}{Z_i} \quad (2.25)$$

$Z_i$  – статистическая сумма, равная

$$Z_i = \sum_{S_i^z=-S}^S \exp(-\beta H_i) = \sum_{S_i^z=-S}^S \exp(\beta \bar{H} S_i^z) \quad (2.26)$$

или

$$Z_i = \frac{\sinh\left(\beta \bar{H} \left(S + \frac{1}{2}\right)\right)}{\sinh\left(\frac{\beta \bar{H}}{2}\right)} \quad (2.27)$$

где принято, что

$$S = |\vec{S}_i| \quad (2.28)$$

В результате получим

$$\langle S^z \rangle + \langle \Delta S^z \rangle = B_S(\beta S \bar{H}) \quad (2.29)$$

где  $B_S(\beta S \bar{H})$  – это функция Бриллюэна, определяемая выражением

$$B_S(\beta S \bar{H}) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{(2S+1)\beta S \bar{H}}{2S}\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{\beta S \bar{H}}{2S}\right) \quad (2.30)$$

Если  $H^z$  очень слабое, можно считать, что  $\Delta S^z \rightarrow 0$  и в этом случае можно разложить функцию Бриллюэна в ряд по малым параметрам в окрестности  $x_0 = \beta \xi_i S \langle S^z \rangle$

$$\langle \Delta S^z \rangle = \frac{S}{k_B T} (S H^z + S \xi_i \langle \Delta S^z \rangle) \frac{\partial B_S(x_0)}{\partial x_0} \quad (2.31)$$

Если  $H^z = 0$  то в этом случае

$$\langle S^z \rangle = S B_S(x_0) \quad (2.32)$$

При высоких температурах, очевидно, что  $\beta \langle S^z \rangle \ll 1$  и

$$B_S(\beta S \bar{H}) \approx \frac{2S+1}{2S} \beta S \bar{H} - \frac{[S^2 + (S+1)^2](S+1)}{90S^3} (\beta S \bar{H})^3 + O((\beta S \bar{H})^5) \quad (2.33)$$

В результате выражение (32) приводит к уравнению

$$\langle S^z \rangle \left[ \frac{\xi_i S(S+1)}{3k_B T} - 1 \right] = \frac{S(S+1)[S^2 + (S+1)^2]}{90} \left( \frac{\xi_i}{k_B T} \right)^3 \langle S^z \rangle^3 \quad (2.34)$$

Это уравнение имеет ненулевое решение  $\langle S^z \rangle \neq 0$  только если

$$\frac{(2J^m C_1 + J_{mf} \delta_{i,4} P_{i+1} C_2) S(S+1)}{6k_B T} - 1 > 0 \quad (2.35)$$

Отсюда следует условие, определяющее критическую температуру для магнитного интерфейсного слоя пленки

$$T < \frac{(2J^m C_1 + J_{mf} \delta_{i,4} P_{i+1} C_2) S(S+1)}{6k_B} = T_c \quad (2.36)$$

Аналогичным образом, для  $H_l$  можно записать уравнения среднего поля, тогда получим для  $\langle P^z \rangle + \langle \Delta P^z \rangle$

$$\langle P^z \rangle + \langle \Delta P^z \rangle = P B_P(\beta P \bar{H}_2) \quad (2.37)$$

где  $B_P(\beta P \bar{H}_2)$  - это функция Бриллюэна, она имеет вид

$$B_P(\beta P \bar{H}_2) = \frac{2P+1}{2P} \coth\left(\frac{(2P+1)\beta P \bar{H}_2}{2P}\right) - \frac{1}{2P} \coth\left(\frac{\beta P \bar{H}_2}{2P}\right) \quad (2.38)$$

В отсутствии внешнего электрического поля, запишем

$$\langle P^z \rangle = PB_P(y_0) \quad (2.39)$$

здесь принято, что

$$y_0 = \frac{1}{k_B T} \left( J^f C_3 P \langle P^z \rangle + y_1 (\langle S^z \rangle + \langle \Delta S^z \rangle) \right) \quad (2.40)$$

$$y_1 = J_{mf} C_2 \frac{P}{2} \delta_{l,5} S_{l-1}^z \quad (2.41)$$

В области высоких температур, уравнение

$$\langle P^z \rangle = PB_P(y_0)$$

запишется в виде

$$\langle P^z \rangle = \frac{P+1}{k_B T} \left( J^f C_3 P \langle P^z \rangle + y_1 (\langle S^z \rangle + \langle \Delta S^z \rangle) \right) - \frac{[P^2 + (P+1)^2](P+1)}{90P^3} \left( \frac{J^f C_3 P \langle P^z \rangle + y_1 (\langle S^z \rangle + \langle \Delta S^z \rangle)}{k_B T} \right)^3 \quad (2.42)$$

Для исследуемой сверхрешетки с чередующимися магнитной и сегнето-электрической подсистемами можно получить для каждого слоя следующую систему уравнений

$$\langle S_{1,4}^z \rangle + \langle \Delta S_{1,4}^z \rangle = SB_{\varphi 1-4} + SU_{\psi 1-4} \quad (2.43)$$

Для первого и четвертого магнитных слоев (поверхностных). Здесь введены следующие обозначения

$$B_{\varphi 1-4} = B_S \left( \left( \frac{J^m SC_1}{k_B T} + \frac{J_{mf} SC_2}{k_B T} \langle P_{5,8}^z \rangle \right) \langle S_{1,4}^z \rangle + \frac{J^m S}{k_B T} \langle S_{2,3}^z \rangle \right) \quad (2.44)$$

$$U_{\psi 1-4} = \left( \left( \frac{J^m SC_1}{k_B T} + \frac{J_{mf} SC_2}{k_B T} \langle P_{5,8}^z \rangle \right) \langle \Delta S_{1,4}^z \rangle + \frac{HS^2}{k_B T} \frac{\partial B_S(u)}{\partial u} \right) \quad (2.45)$$

$$u = \left( \frac{J^m SC_1}{k_B T} + \frac{J_{mf} SC_2}{k_B T} \langle P_{5,8}^z \rangle \right) \langle S_{1,4}^z \rangle \quad (2.46)$$

Для внутреннего второго магнитного слоя

$$\langle S_2^z \rangle + \langle \Delta S_2^z \rangle = SB_{\varphi 2} + SU_{\psi 2} \quad (2.47)$$

$$B_{\varphi 2} = B_S \left( \frac{J^m SC_1 \langle S_2^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} SC_2 \langle S_{1,4}^z \rangle}{k_B T} \langle P_{7,8}^z \rangle + \frac{J^m S}{k_B T} \langle S_3^z \rangle \right) \quad (2.48)$$

$$U_{\psi 2} = -S^2 \left( \left( \frac{J^m C_1 \langle \Delta S_2^z \rangle}{k_B T} + \frac{H}{k_B T} \right) \frac{\partial B_S \left( \frac{J^m SC_1 \langle S_2^z \rangle}{k_B T} \right)}{\partial \frac{J^m SC_1 \langle S_2^z \rangle}{k_B T}} \right) \quad (2.49)$$

Для третьего (внутреннего) магнитного слоя

$$\langle S_3^z \rangle + \langle \Delta S_3^z \rangle = SB_{\varphi 3} + SU_{\psi 3} \quad (2.50)$$

$$B_{\varphi 3} = B_S \left( \frac{J^m C_1 \langle S_3^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} S \langle S_2^z \rangle}{k_B T} \langle P_{7,8}^z \rangle + \frac{J^m S}{k_B T} \langle S_{1-4}^z \rangle \right) \quad (2.51)$$

$$U_{\psi 3} = -S^2 \left( \left( \frac{J^m C_1 \langle \Delta S_3^z \rangle}{k_B T} + \frac{H}{k_B T} \right) \frac{\partial B_S \left( \frac{J^m SC_1 \langle S_{1,4}^z \rangle}{k_B T} \right)}{\partial \frac{J^m SC_1 \langle S_{1,4}^z \rangle}{k_B T}} \right) \quad (2.52)$$

Для первого и четвертого сегнетоэлектрических слоев (поверхностных).

$$\langle P_{5,8}^z \rangle + \langle \Delta P_{5,8}^z \rangle = PB_{\varphi 5,8} + PU_{\psi 5,8} \quad (2.53)$$

Здесь принято, что

$$B_{\varphi 5,8} = B_P \left( \frac{J^f PC_3 \langle P_{5,8}^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} PC_2 \langle S_{1,4}^z \rangle^2}{k_B T} + \frac{J^f P \langle P_6^z \rangle}{k_B T} \right) \quad (2.54)$$

$$U_{\psi 5,8} = -P^2 \left( \frac{J^f C_3 \langle \Delta P_{5,8}^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} C_2 \langle S_{1,4}^z \rangle^2}{k_B T} + \frac{E}{k_B T} \right) \frac{\partial B_S(v)}{\partial v} \quad (2.55)$$

$$v = \frac{J^f PC_3 \langle P_{5,8}^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} SC_2 \langle S_{1,4}^z \rangle^2}{k_B T} \quad (2.56)$$

Для внутреннего второго сегнетоэлектрического слоя

$$\langle P_6^z \rangle + \langle \Delta P_6^z \rangle = PB_{\varphi 6} + PU_{\psi 6} \quad (2.57)$$

$$B_{\varphi 6} = B_P \left( \frac{J^f P C_3 \langle P_6^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} P \langle S_{1,4}^z \rangle^2}{k_B T} + \frac{J^f P \langle P_7^z \rangle}{k_B T} \right) \quad (2.58)$$

$$U_{\psi 6} = -P^2 \left( \frac{J^f C_3 \langle \Delta P_6^z \rangle}{k_B T} + \frac{E}{k_B T} \right) \frac{\partial B_P \left( \frac{J^f C_3 P}{k_B T} \right)}{\partial \left( \frac{J^f C_3 P}{k_B T} \right)} \quad (2.59)$$

Для внутреннего третьего сегнетоэлектрического слоя

$$\langle P_7^z \rangle + \langle \Delta P_7^z \rangle = P B_{\varphi 7} + P U_{\psi 7} \quad (2.60)$$

$$B_{\varphi 7} = B_P \left( \frac{J^f P C_3 \langle P_7^z \rangle}{k_B T} + \frac{J_{mf} P \langle S_{1,4}^z \rangle^2}{k_B T} + \frac{J^f P \langle P_6^z \rangle}{k_B T} \right) \quad (2.61)$$

$$U_{\psi 7} = -P^2 \left( \frac{J^f C_3 \langle \Delta P_7^z \rangle}{k_B T} + \frac{E}{k_B T} \right) \frac{\partial B_P \left( \frac{J^f C_3 P}{k_B T} \right)}{\partial \left( \frac{J^f C_3 P}{k_B T} \right)} \quad (2.62)$$

Приведем результаты расчетов для зависимости параметров порядка магнитной и сегнетоэлектрической подсистем от величины магнитоэлектрического взаимодействия. На рис. 2.14 приведены температурные зависимости поляризации и намагниченности поверхностных и внутренних слоев. Следует отметить, что в приближении среднего поля значения намагниченности и сегнетоэлектрической поляризации совпадают, так как мы предполагаем, что  $S = P = 1$ , а для вектора спина мы пренебрегаем компонентами  $S_x$  и  $S_y$ . Поэтому в приближении среднего поля вектор спина и эквивалентен вектору поляризации.

Сравнение Рис. 2.14 с Рис. 2.3 – Рис. 2.5 позволяет сделать вывод о согласованности результатов моделирования методом Монте-Карло и расчетов в приближении теории среднего поля. Видно, что в обоих случаях существует сильная зависимость параметров порядка на поверхностных слоях сверхрешетки от величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрической пленки. Оба подхода демонстрируют схожее различие в параметрах порядка для поверхностных и внутренних слоев.

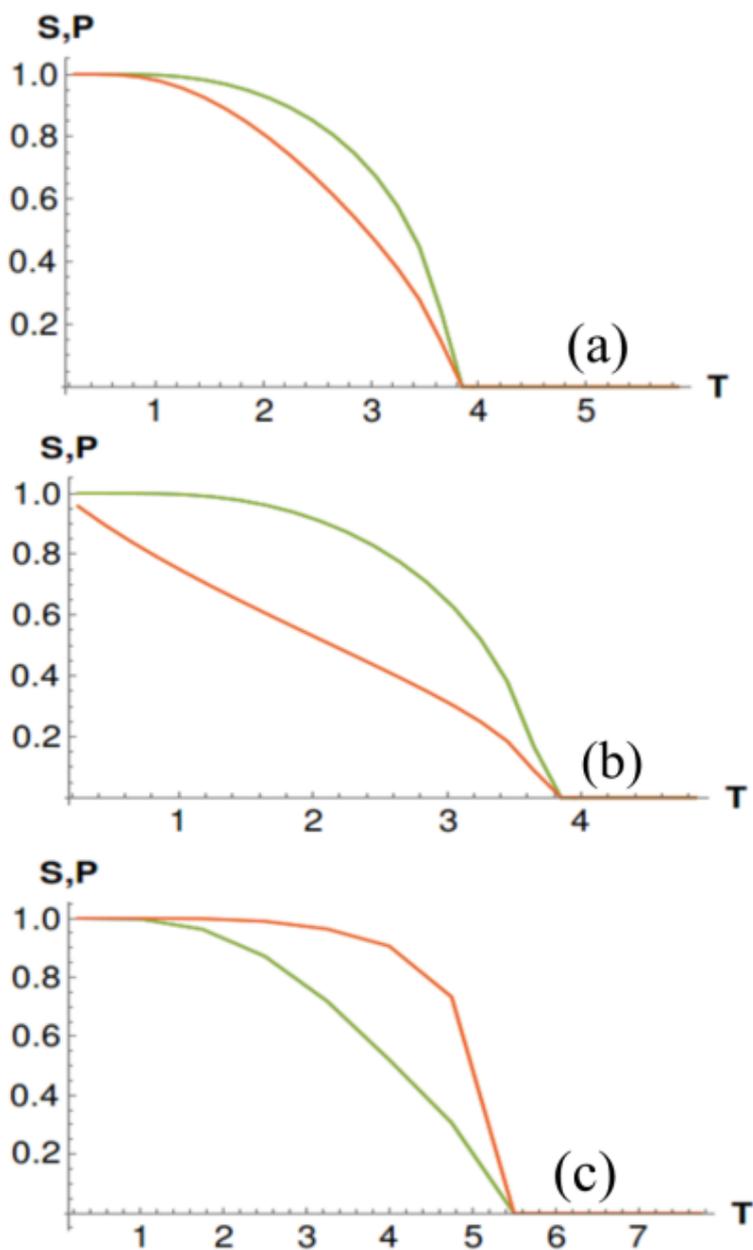


Рис. 2.14. (а) Зависимость намагниченности и поляризации в зависимости от температуры для  $J^m = 1$ ,  $J^f = 1$ ,  $J_{mf} = J_{mf1} = J_{mf2} = -0.12$ ,  $H^z = E^z = 0$ . Красный цвет соответствует намагниченности и поляризации интерфейсного слоя, зеленый цвет - параметры порядка внутренних слоев  $M_{2,3}$  и  $P_{2,3}$ ; (б) Зависимость намагниченности и поляризации в зависимости от температуры для  $J^m = 1$ ,  $J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -0.55$ ,  $H^z = E^z = 0$ . (с) Зависимость намагниченности и поляризации в зависимости от температуры для  $J^m = 1$ ,  $J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -0.85$ ,  $H^z = E^z = 0$ .  $|\vec{S}| = |P| = 1$ .

Предположим, что  $|\vec{P}| = 1.5$ ,  $|\vec{S}| = 1.0$ . В этом случае значения температуры перехода для магнитной и сегнетоэлектрической пленки, вычисленные в приближении среднего поля имеют разные величины (Рис. 2.15).

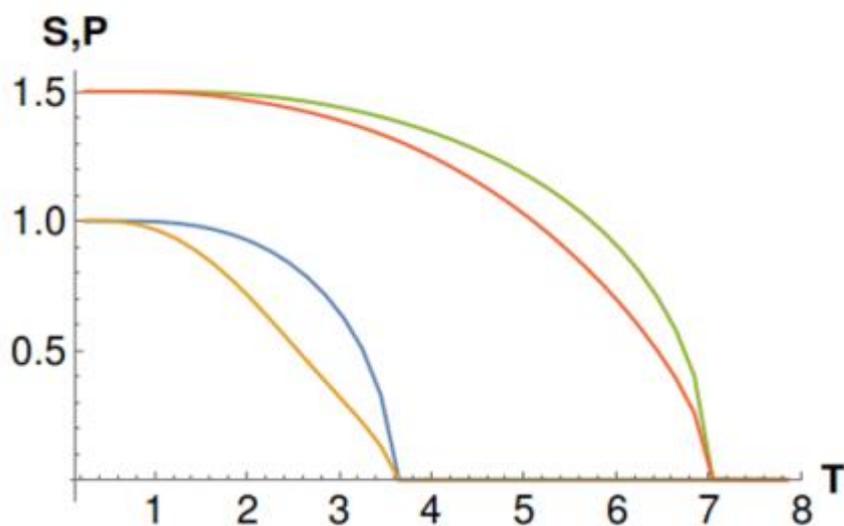


Рис. 2.15: Зависимость намагниченности и поляризации в зависимости от температуры для  $|\vec{S}| = 1$ ,  $|P| = 1.5$ ,  $J^m = 1$ ,  $J^f = 1$ ,  $J_{mf} = -0.12$ ,  $H^z = E^z = 0$ . Красный цвет соответствует поверхностной поляризации  $P$ , желтый цвет - поверхностной намагниченности  $M$ , синии цвет - намагниченность внутренних слоев  $M_{2,3}$ , зеленый цвет - поляризация внутренних слоев  $P_{2,3}$ .

## § 6. Выводы к главе

В этой главе исследовано влияние температуры, внешних магнитных и электрических полей, параметров магнитоэлектрической связи ближайших соседей и соседей, следующих за ближайшими в сверхрешетке мультиферроика, образованной чередующимися магнитными и сегнетоэлектрическими пленками. Магнитные пленки в работе выбирались в качестве пленки с простой кубической решеткой, с гейзенберговскими спинами. На каждом узле решетки в сегнетоэлектрических пленках задавались величины  $z$ -компонент электрических поляризации.

Выполнено моделирование методами Монте Карло и исследованы температурных зависимостей различных физических величин, для анализа фазовых переходов, происходящих в каждой подсистеме, а также влияния на эти процессы магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе двух подсистем и приложенных магнитных и электрических полей.

Обнаружено изменение характера фазового перехода при увеличении величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия. Построены фазовые диаграммы, которые показывают тесную взаимосвязь магнитных и сегнетоэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу и отличающиеся значения температур переходов внутри пленок и на поверхностных слоях.

# Глава 3. Киральное магнитоэлектрическое взаимодействие в магнито-сегнетоэлектрических сверхрешетках: скирмионы

## § 1. Введение

Самым обширным классом материалов для обнаружения скирмионов являются поверхности и интерфейсы магнитных материалов, где сама геометрия образца нарушает центральную симметрию и, следовательно, может привести к появлению киральных взаимодействий, аналогичных взаимодействию Дзялошинского-Мории. Устойчивость скирмионов, а также низкий энергетический барьер для дискретного изменения состояния позволяет использовать скирмионы в качестве энергоэффективных битов информации (наличие или отсутствие скирмиона в определенной области функционального элемента сопоставляется с информационным логическим битом).

В этой главе рассмотрим сверхрешетку, состоящую из чередующихся магнитных и сегнетоэлектрических пленок. Целью данной главы является рассмотрение и обоснование новой модели взаимодействия между магнитной и сегнетоэлектрической пленками в сверхрешетке. Предлагаемый тип интерфейсного магнитоэлектрического взаимодействия приводит к неколлинеарным спиновым конфигурациям в основном состоянии на поверхностном магнитном слое в отсутствие внешнего магнитного поля и к скирмионам в случае действия внешнего магнитного поля  $\vec{H}$ , приложенного перпендикулярно плоскости пленок. Моделирование методом Монте-Карло проводится для исследования фазовых переходов, происходящих в сверхрешетке и зависимости величины межфазной связи на динамику и кинетику фазовых переходов. При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации, выполненные автором лично или в соавторстве, в которых согласно положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [173, 103, 210, 220, 222]. Авторский вклад заключался в участии в постановке задач,

выполнении исследования, написании программ для моделирования фазовых переходов и критических явлений, отладке программ для расчетов на суперкомпьютере, обсуждении результатов и подготовке статей в перечисленных публикациях.

## § 2. Модель и основное состояние

### 2.1. Модель

Рассмотрим сверхрешетку, состоящую из чередующихся магнитных и сегнетоэлектрических пленок (см. Рис. 3.1а). Для простоты будем считать, что обе пленки имеют структуру простой кубической решетки с одинаковой постоянной решетки. Гамильтониан магнитоэлектрической сверхрешетки, запишем следующим образом

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (3.1)$$

где  $H_m$  и  $H_f$  - гамильтонианы ферромагнитной и сегнетоэлектрической подсистем соответственно, а  $H_{mf}$  - гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух соседних пленок. Опишем гамильтониан магнитной пленки с помощью спиновой модели Гейзенберга на простой кубической решетке:

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (3.2)$$

где  $\vec{S}_i$  - спин на  $i$ -м узле решетки,  $\vec{H}$  - внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости пленки вдоль оси  $z$ ,  $J_{ij}^m > 0$  параметр ферромагнитного взаимодействия между спином и его ближайшими соседями (NN), сумма берется по парам спинов ближайших соседей. Предполагаем  $J_{ij}^m > 0$  одинаковым, а именно  $J^m$ , для всех спинов магнитной пленки в плоскости и межплоскостными спинами. Для сегнетоэлектрической подсистемы, для про-

стоты, мы предполагаем, что электрические поляризации являются изингово-подобными векторами с амплитудой равной 1, направленными в направлении  $\pm z$ . Гамильтониан подсистемы зададим в виде

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_i E^z \cdot P_i^z \quad (3.3)$$

где  $\vec{P}_i$  - поляризация  $i$  - го узле простой кубической решетки,  $J_{ij}^f > 0$  - параметр взаимодействия между ближайшими соседями, сумма берется по соседним (NN) узлам. Аналогично ферромагнитной подсистеме, мы возьмем одинаковое  $J_{ij}^f = J^f$  для всех сегнетоэлектрических узлов. Внешнее электрическое поле  $E$  считаем направленным вдоль оси  $z$ .

Гамильтониан для магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух пленок зададим в виде

$$H_{mf} = \sum_{i,j,k} J_{ijk}^{mf} \vec{D}_{i,j} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \quad (3.4)$$

В этом выражении  $J_{ijk}^{mf} \vec{D}_{i,j}$  играет роль вектора Дзялошинского - Мории, перпендикулярного плоскости  $xу$ .

$$\begin{aligned} \vec{D}_{i,j} &= \vec{x} \times \vec{r}_{i,j} \\ \vec{D}_{j,i} &= \vec{x} \times \vec{r}_{j,i} = -\vec{D}_{i,j} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Предположим для нашей модели

$$J_{ijk}^{mf} = J_{ij}^{mf} P_k \quad (3.6)$$

$J_{ijk}^{mf}$  это параметр кирального магнитоэлектрического взаимодействия (играет роль вектора Дзялошинского – Мории) между электрической поляризацией  $P_k$  на интерфейсном сегнетоэлектрическом слое и двумя ближайшими (NN) спинами  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ , на интерфейсном ферромагнитном слое. Далее мы предполагаем,

что величина  $J_{ij}^{mf} = J^{mf}$  независима от  $(i; j)$ . Выбрав вектор смещения сегнетоэлектрического лиганда  $\vec{R}$  в плоскости  $xu$ , перпендикулярной к  $\vec{r}_{ij}$  (см. Рис. 3.1), запишем

$$\vec{R} \times \vec{r}_{ij} = a\vec{z}e_{i,j}$$

где  $e_{i,j} = -e_{j,i} = 1$ ,  $a$  - это константа, а  $\vec{z}$  - единичный вектор вдоль оси  $z$ .

Отметим здесь, что векторное произведение  $[\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$  меняет свой знак с перестановкой индексов  $i$  и  $j$ , но сама энергия магнитоэлектрического взаимодействия, в виде (3.4) при этом не меняет свой знак, так как при перестановке индексов будет менять знак  $\vec{D}_{i,j}$ . Обратим внимание, что если все магнитоэлектрическое взаимодействие является антисимметричным, то при суммировании по узлам решетки член  $H_{mf}$  обнулится. Поэтому в модель вводится коэффициент  $e_{i,j}$ , представленный в формуле (3.7). Таким образом, учитывая все вышесказанное выражение для магнитоэлектрического взаимодействия можем записать в форме

$$\begin{aligned} H_{mf} &= \sum_{i,j,k} J^{mf} P_k (\vec{R} \times \vec{r}_{i,j}) \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \\ &= \sum_{i,j,k} J^{mf} P_k e_{i,j} \vec{z} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \\ &= \sum_{i,j,k} J^{mf} e_{i,j} \vec{P}_k \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \end{aligned} \quad (3.7)$$

где постоянная  $a$  включена в  $J^{mf}$ .

Как можно видеть из выражения (3.7) параметр взаимодействия на интерфейсе пропорционален среднему значению  $\langle P_k \rangle$ , в свою очередь зависящему от  $T$ . Если  $\langle P_k \rangle$  примет нулевое значение до коллапса скирмионной структуры, в этом случае скирмионная структура не формируется. Поэтому

сегнетоэлектрическую пленку мы задаем моделью Изинга с параметром сегнетоэлектрического взаимодействия  $J^f$ , а поляризацию определяем Изинговским вектором. Поскольку необходимо, чтобы температура перехода в сегнетоэлектрической пленке была выше, чем у магнитной подсистемы. Следует отметить, что переходы в магнитной подсистеме определяются конкуренцией между  $T$  и магнитным упорядочением (скирмионами), которое в свою очередь является результатом конкуренции между обменным взаимодействием, магнитоэлектрическим взаимодействием, (а именно  $\langle P_k \rangle$ ) и внешним магнитным полем  $H$ . Предполагаем, что магнитоэлектрическое взаимодействие имеет место только для ближайших соседей. Очевидно, что если вектор  $\vec{D}$  окажется направленным или будет выбран перпендикулярно плоскости  $xu$ , то энергия магнитоэлектрического взаимодействия будет минимальной, когда спины лежат в плоскости  $xu$ , поскольку вектор  $\vec{D}$  будет иметь направление параллельное результату векторного произведения  $[\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$ . Можно предположить любую ориентацию для  $\vec{D}$ , но в этом случае для получения минимума энергии плоскость, содержащая  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ , должна быть перпендикулярна  $\vec{D}$ : если это не так, то анализ основного состояния спиновой конфигурации весьма затруднителен. Сверхрешетка и взаимодействие на границе раздела показано на рис. 3.1.

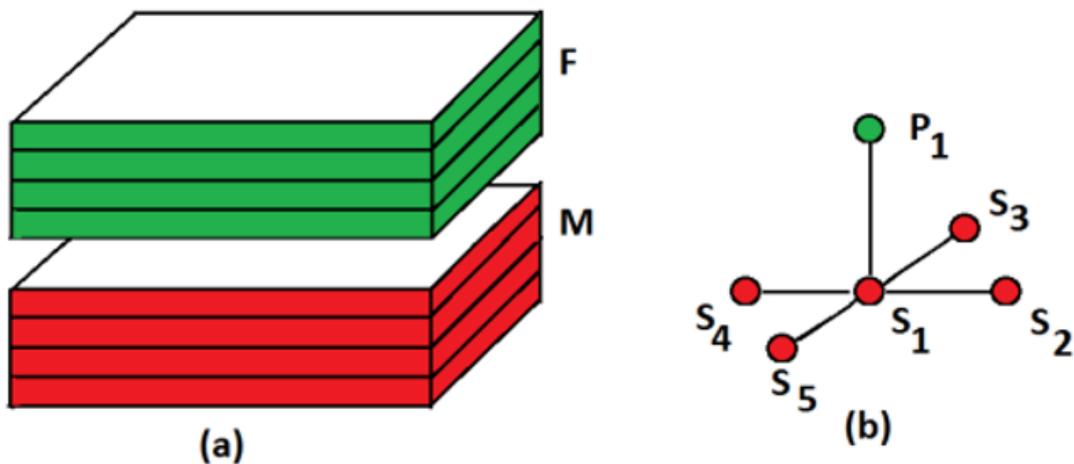


Рис. 3.1. (а) Сверхрешетка, состоящая из чередующихся сегнетоэлектрических слоев, обозначенных  $F$ , и магнитной пленки, обозначенной  $M$ ; (б) Поляризация  $P_1$  на интерфейсе взаимодействует с 5 спинами в магнитном слое. Комментарии даны в тексте.

Поляризация на интерфейсе взаимодействует с 5 спинами на поверхностном магнитном слое согласно формуле (3.7), например, (см. Рис. 3.1б)

$$J^{mf} \vec{P}_1 \cdot [e_{1,2}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) + e_{1,3}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_3) + e_{1,4}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_4) + e_{1,5}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_5)] \quad (3.8)$$

Поскольку мы предполагаем, что  $\vec{P}_k$  - это вектор с амплитудой равной единице, направленный вдоль оси  $z$ , и его  $z$  компонента равна  $P_k^z = \pm 1$ , в дальнейшем всюду будет использоваться обозначение  $P_k^z$  для электрической поляризации вместо  $\vec{P}_k$ . Из выражения (3.7) следует, что магнитоэлектрическое взаимодействие  $J^{mf}$  благоприятствует вращающейся спиновой структуре. И магнитоэлектрическое взаимодействие конкурирует с обменным взаимодействием  $J$  в гамильтониане магнитной пленки  $H_m$ , которое благоприятствует коллинеарным спиновым конфигурациям. Обычно магнитное или сегнетоэлектрическое обменное взаимодействие является наибольшим членом в гамильтониане, поэтому во многих ситуациях магнитоэлектрический эффект незначителен. Однако в наноразмерных сверхрешетках магнитоэлектрическое взаимодействие имеет определяющее значение для создания неколлинеарного дальнего спинового упорядочения.

Предположение, что  $\vec{P}_k$  направлено вдоль оси  $z$ , сделано для того, чтобы поляризация была пропорциональна вектору Дзялошинского - Мории [см. формулы (3.4) - (3.7)]. Вектор  $\vec{D}$  принимается направленным вдоль оси  $z$ , чтобы спины в магнитных слоях были расположены в  $xu$  - плоскости, в отсутствие приложенного поля. Кроме того, предположение о поляризациях как

Изинговских векторах введено для того, чтобы зафиксировать вектор  $\vec{D}$  в направлении оси  $z$ . Это предположение подтверждается тем фактом, что в сегнетоэлектрических материалах, если атомы смещены в одном направлении, в этом же направлении возникает спонтанная поляризация как показано на Рис. 3.16.

## 2.2. Основное состояние

### 2.2.1. Основное состояние в отсутствии внешнего магнитного поля

Рассмотрим структуру основного состояния в отсутствии внешнего магнитного поля. Поскольку в нашей модели вектора электрических поляризации направлены по оси  $z$ , магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе минимально, когда вектора  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$  лежат в плоскости интерфейса  $xu$  и расположены перпендикулярно друг другу. Однако ферромагнитное обменное взаимодействие между спинами будет конкурировать с магнитоэлектрическим взаимодействием, стремясь расположить спины параллельно друг другу. В результате получится не коллинеарная конфигурация. Отметим, что сегнетоэлектрическая пленка всегда имеет поляризацию, направленную вдоль оси  $z$ , даже на интерфейсе при наличии магнитоэлектрического взаимодействия. Определим спиновые конфигурации основного состояния в магнитной подсистеме свехрешетки в нулевом поле.

Рассмотрим частный случай однослойной магнитной пленки. Выполним минимизацию  $H_{mf}$  в отсутствии внешнего магнитного поля. Из симметрии простой кубической решетки следует, что каждый спин на узле обладает одним и тем же углом поворота  $\theta_{i,j}$  по отношению к своим четырем ближайшим (NN) соседям в плоскости  $xu$ . Выражение для энергии спина  $\vec{S}_i$  на  $i$ -м узле, определяющее соотношение между углом  $\theta$  и обменным параметром  $J^m$  можно записать в виде:

$$E_i = -4J^m S^2 \cos \theta + 8J^{mf} P^z S^2 \sin \theta \quad (3.9)$$

где  $\theta = |\theta_{i,j}|$ . Здесь принято во внимание, что два противоположных ближайших спина имеют противоположные знаки перед слагаемым  $\sin \theta_{i,j}$ , и в то же время разные знаки коэффициента  $e_{i,j}$  в выражении (3.8). Коэффициент 4 в первом слагаемом представляет собой число ближайших спиновых соседей в плоскости, а коэффициент 8 второго слагаемого обусловлен тем, что каждый спин имеет по 4 пары магнитоэлектрической связи с ближайшими соседними поляризациями в верхней и нижней сегнетоэлектрической плоскости. Принимаем, что в основном состоянии  $P^z = 1$ ,  $S = 1$ . Минимизируя энергию спина по углу, найдем

$$\frac{dE_i}{d\theta} = 0 \Rightarrow -\frac{2J^{mf}}{J^m} = \tan \theta \Rightarrow \theta = \arctan\left(-\frac{2J^{mf}}{J^m}\right) \quad (3.10)$$

Значение угла  $\theta$  определяемое соотношением  $-2J^{mf}/J^m$  мы получаем также при численной минимизации энергии сверхрешетки. Видно, что когда  $J^{mf} \rightarrow 0$ , то и  $\theta \rightarrow 0$ , и в противоположном случае, при  $J^{mf} \rightarrow -\infty$ , имеем  $\theta \rightarrow \pi/2$ . В данной главе рассматриваем  $J^{mf} < 0$  поэтому в нашем случае  $\theta > 0$ .

Это соотношение, между углом  $\theta$  и параметром магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$ , будет использовано в главе 4 при расчете спектра спиновых волн, в случае однослойной магнитной пленки, расположенной между сегнетоэлектрическими пленками.

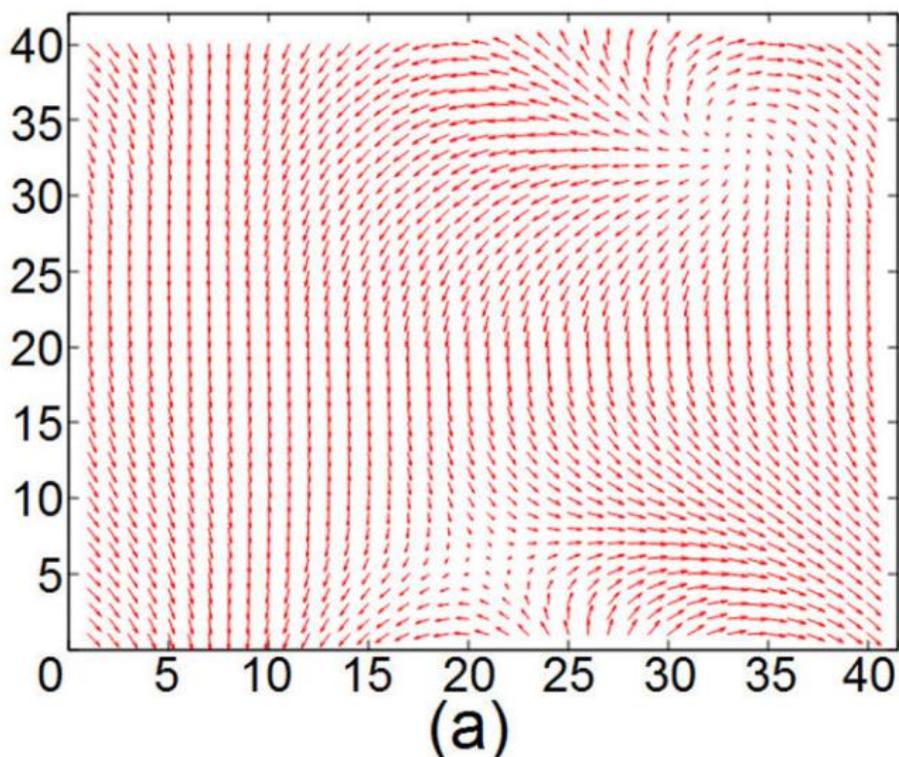
В случае, когда магнитная пленка состоит из нескольких слоев, то угол между NN спинами в каждом магнитном слое отличается от угла в соседних слоях. И для нахождения спиновой конфигурации основного состояния воспользуемся численным методом минимизации энергии - метод наискорейшего

спуска. Он состоит в минимизации энергии каждого спина на узле путем выравнивания рассматриваемого спина по направлению параллельно локальному полю, действующим на него со стороны ближайших соседей NN. Приведем кратко схему численного метода:

1. Генерируем случайную начальную спиновую конфигурацию, затем выбираем один спин на произвольном узле и вычисляем поле взаимодействия, действующее на спин со стороны его ближайших соседей. Выравниваем исследуемый спин в направлении этого поля, после переходим к рассмотрению следующего узла и повторяем данную процедуру, пока не будут рассмотрены все спины. Повторяем этот расчетный цикл, пока полная энергия не примет минимально возможное значение. При выполнении такой итерационной процедуры есть вероятность того, что система может оказаться в метастабильном состоянии при сильных разупорядочивающих систему взаимодействиях, как, например, в спиновых стеклах. Но для однородных трансляционных взаимодействий во многих изученных системах показано, что система с легкостью выходит из области метастабильности, при достаточно большом числе итераций.

Расчеты выполняются для сверхрешетки с латеральными размерами  $N \times N \times L$ . Для большинства расчетов мы используем  $N = 60$  и  $L = 8$ , на систему накладываем периодические граничные условия в плоскости  $xu$ . Для простоты, при исследовании влияния обменных связей на магнитные и сегнетоэлектрические свойства, мы выбираем одинаковую толщину для магнитной и сегнетоэлектрической пленок, а именно  $L_a = L_b = 4 = L/2$ . Параметры обменного взаимодействия между спинами и векторами электрических поляризации принимаются для моделирования равными  $J^m = J^f = 1$ . Для простоты рассмотрим случай, когда в плоскости и между плоскостями обменные магнитные и сегнетоэлектрические взаимодействия между ближайшими соседями положительны. Все результаты получены при  $J^m = J^f = 1$  для разных значений параметра взаимодействия  $J^{mf}$ .

Исследования проводились для области значений параметров взаимодействия  $J^{mf}$ : от  $J^{mf} = -0.05$  до  $J^{mf} = -6.0$  при различных значениях внешних магнитных и электрических полей. Отметим, что метод наискорейшего спуска вычисляет реальное основное состояние с минимальной энергией до значения  $J^{mf} = -1.25$ . При больших значениях угол  $\theta$  стремится к  $\pi/2$ , так что все члены магнитного обмена (скалярные произведения) будут стремиться к нулю, и минимальное значение полной энергии соответствует энергии магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе сверхрешеток. На рисунке 3.2 показаны конфигурации основного состояния магнитного интерфейсного слоя для малых значений  $J^{mf}$ : -0.1, -0.125, -0.15. При таких малых значениях углы отклонения между спинами принимают малые значения, так что конфигурация основного состояния будет ферромагнитной с неколлинеарными доменами.



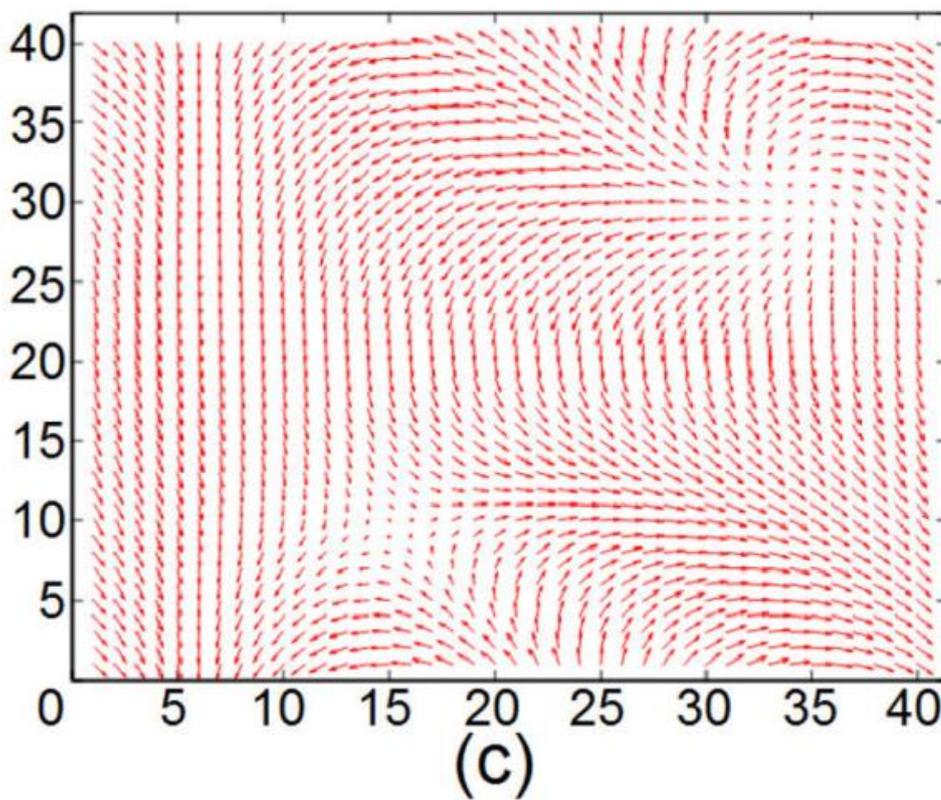
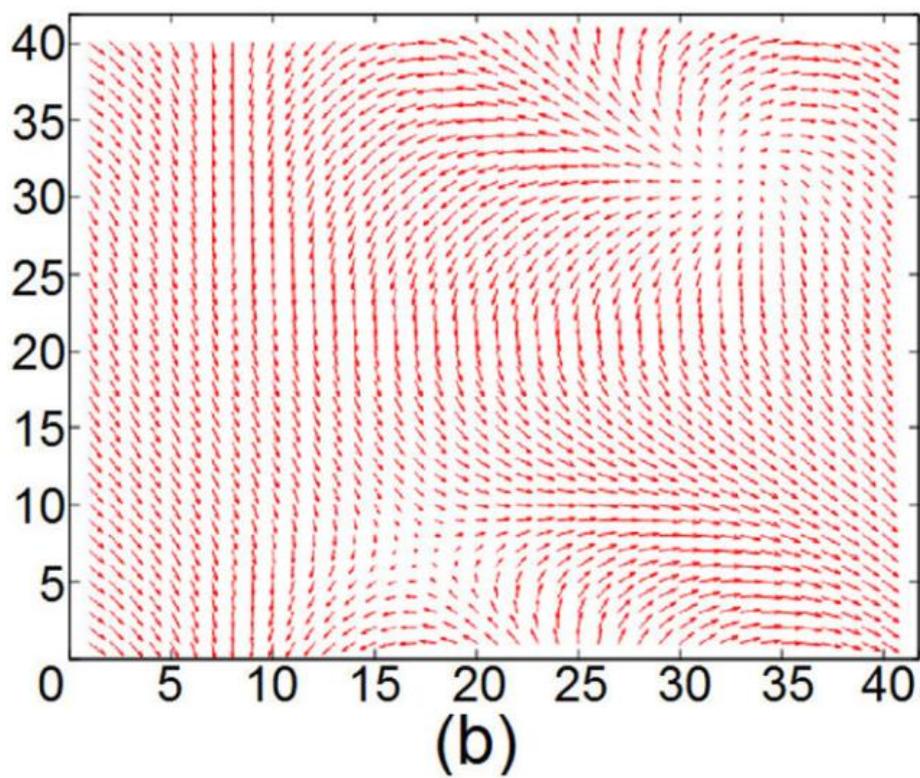
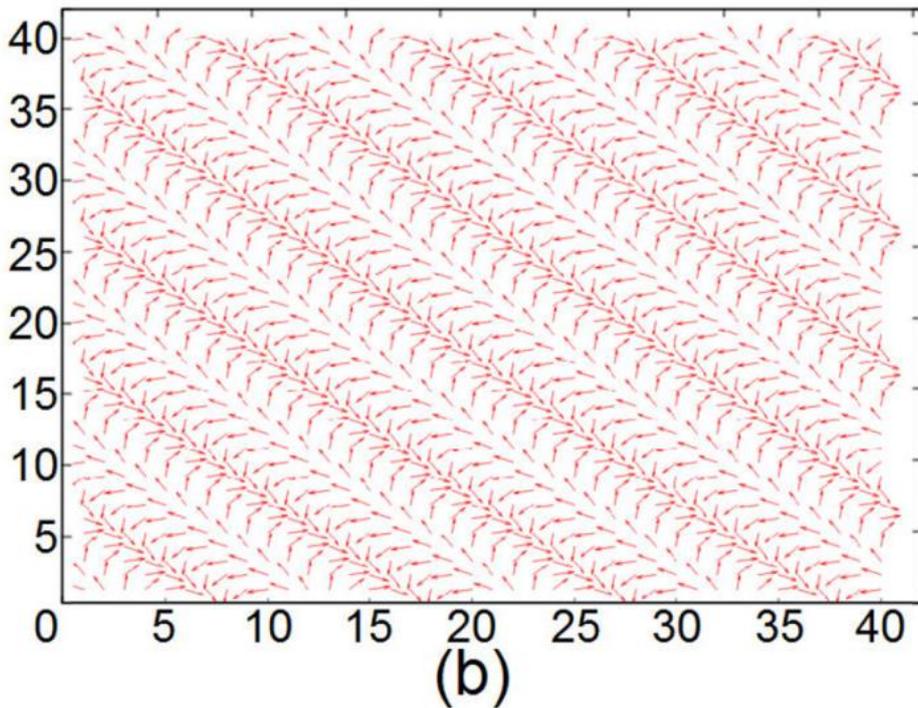
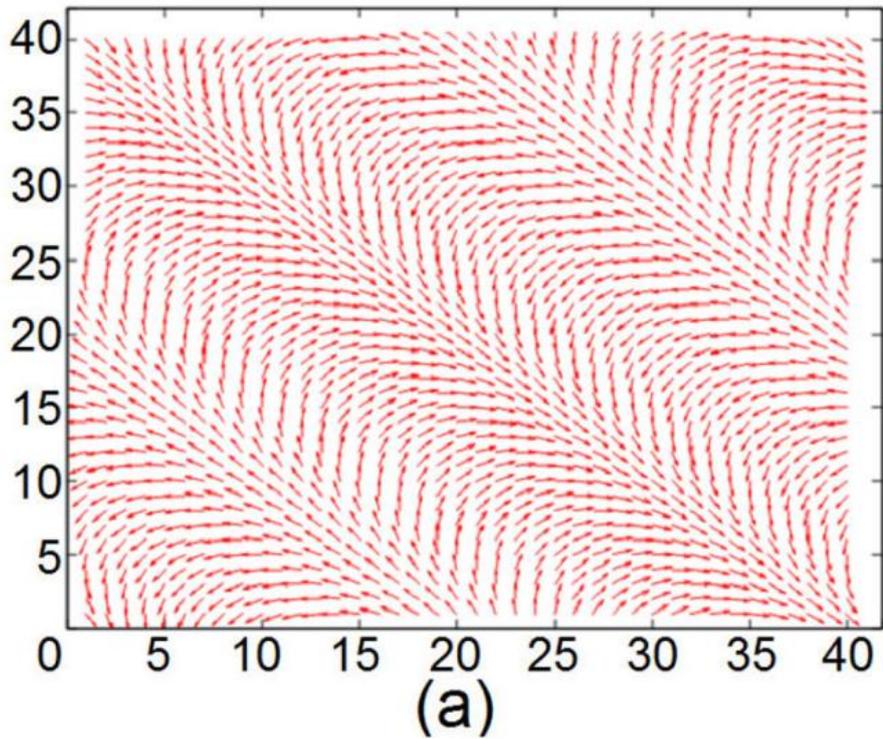


Рис. 3.2. Спиновая конфигурация основного состояния интерфейсного слоя для случаев слабой межфазной связи:  $J^{mf} = -0.1$  (a),  $-0.125$  (b),  $-0.15$  (c), внешнее магнитное поле  $H = 0$

Обратим внимание на то, что углы во внутренних магнитных слоях различны, но конфигурации основного состояния имеют одинаковую структуру.

При больших значениях параметра  $J^{mf}$  спиновые конфигурации основного состояния обладают уже периодической структурой без смешанных областей (доменов). На рис. 3.3 показаны примеры, где  $J^{mf} = -0.45$  и  $-1.2$ .



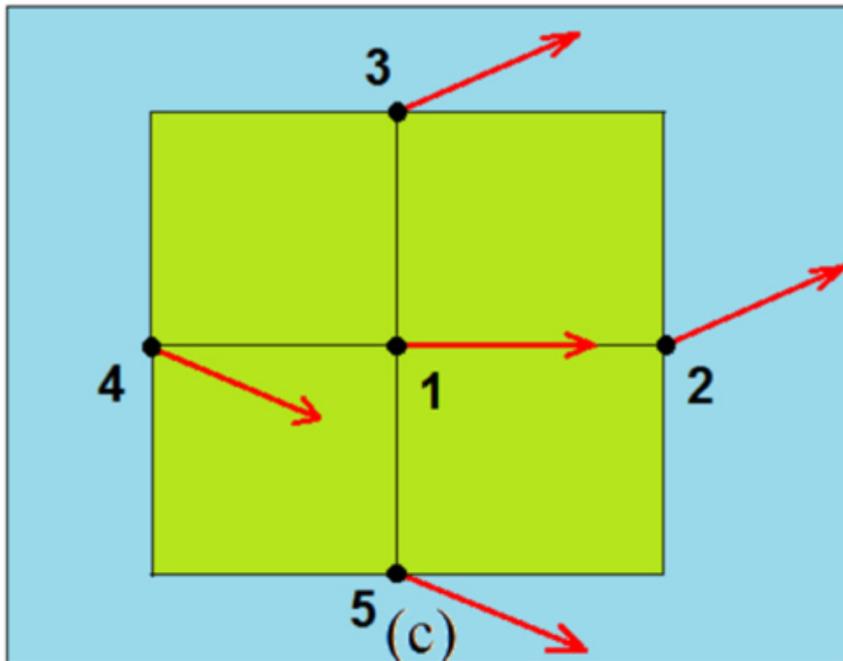


Рис. 3.3. Спиновые конфигурации основного состояния поверхностного слоя для  $J^{mf} = -0.45$  (a),  $-1.2$  (b), Схематичное увеличение элементарной ячейки между ближайшими спинами (c). внешнее магнитное поле  $H = 0$

Несколько замечаний:

i) Углы между ближайшими взаимодействующими спинами одинаковы как в направлении  $x$ , так и в направлении  $y$ . Схематичное масштабирование, изображенное на рис. 3.3с показывает, что спины по одной и той же диагонали (спины 2 и 2, спины 4 и 5) параллельны. Это объясняет структуры основного состояния, изображенные на рис. 3.3а и 3.3б;

ii) Период диагональных параллельных линий зависит от значения угла  $\theta$  или параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$  (сравните рис. 3.3а и рис. 3.3б). При больших латеральных размерах  $N$  периодические условия не оказывают значительного влияния.

### 2.2.2. Основное состояние во внешнем магнитном поле

Направим внешнее магнитное поле перпендикулярно плоскости  $xu$  сверхрешетки. Как известно, в системах, где некоторые спиновые ориентации антипараллельны внешнему магнитному полю, например, в антиферромагнетиках, спины, направленные вниз (противоположно направлению внешнего магнитного поля) не могут принять направление поля без потери энергии взаимодействия со спинами, направленными параллельно полю. Поэтому в антиферромагнетиках спины поворачиваются в направлении, почти перпендикулярном полю, оставаясь при этом параллельными друг другу. Это явление называется «спин флоп». В других, более сложных системах, таких как, например, тонкие пленки гелиомагнетики во внешнем поле, наблюдались более сложные реакции спинов на действие внешнего поля, приводящие к интересным явлениям, таким как частичный фазовый переход в тонких гелиомагнитных пленках [29]. В рассматриваемой сверхрешетке имеется конкуренция между приложенным магнитным полем, которое выравнивает спины вдоль направления  $z$ , и магнитоэлектрическим взаимодействием, которое действует так, чтобы спины расположились перпендикулярно друг другу в плоскости  $xu$ . Как следствие, устанавливается некоторый баланс конкурирующих взаимодействий, который представляет собой структуру скирмионов. На рисунке 3.4 (а) показана конфигурация основного состояния для  $J^{mf} = -1.1$ : для первого (поверхностного) магнитного слоя с внешним магнитным полем  $H = 0.1$ . На рисунке 3.4 (b) изображена трехмерная (3D) визуализация. Можно наблюдать начало зарождения скирмионной структуры на границе раздела и во внутреннем магнитном слое.

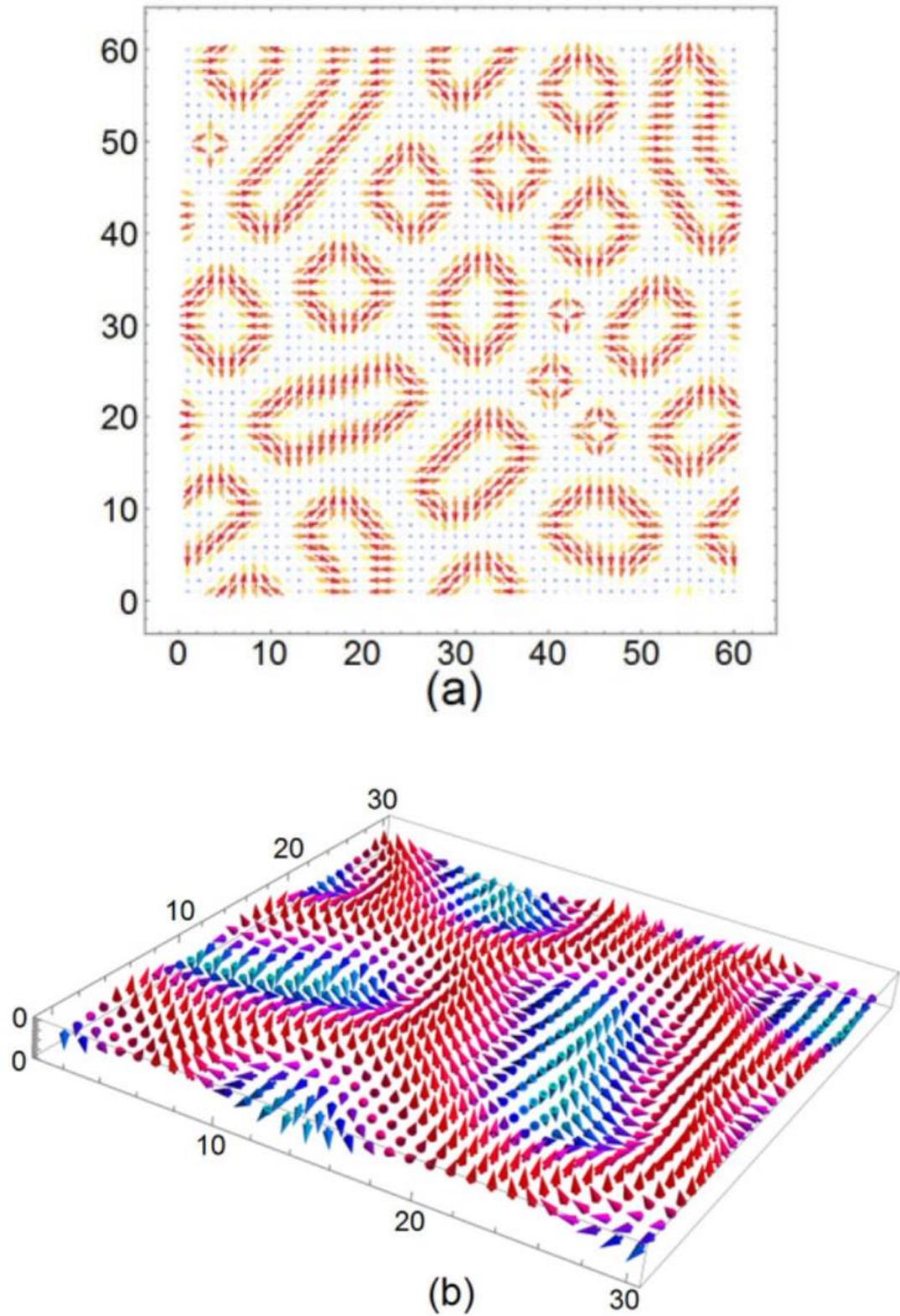


Рис. 3.4. Спиновые конфигурации основного состояния поверхностного слоя для (a)  $J^{mf} = -1.1$  и  $H = 0.1$ , (b) Трехмерная (3D) визуализация спиновой конфигурации основного состояния поверхностного слоя.

На рисунке 3.5(a) показана конфигурация основного состояния для  $J^{mf} = -1.1$  для первого (поверхностного) магнитного слоя с внешним магнитным слоем  $H = 0.2$ . На рисунке 3.5(b) изображена трехмерная (3D) визуализация.

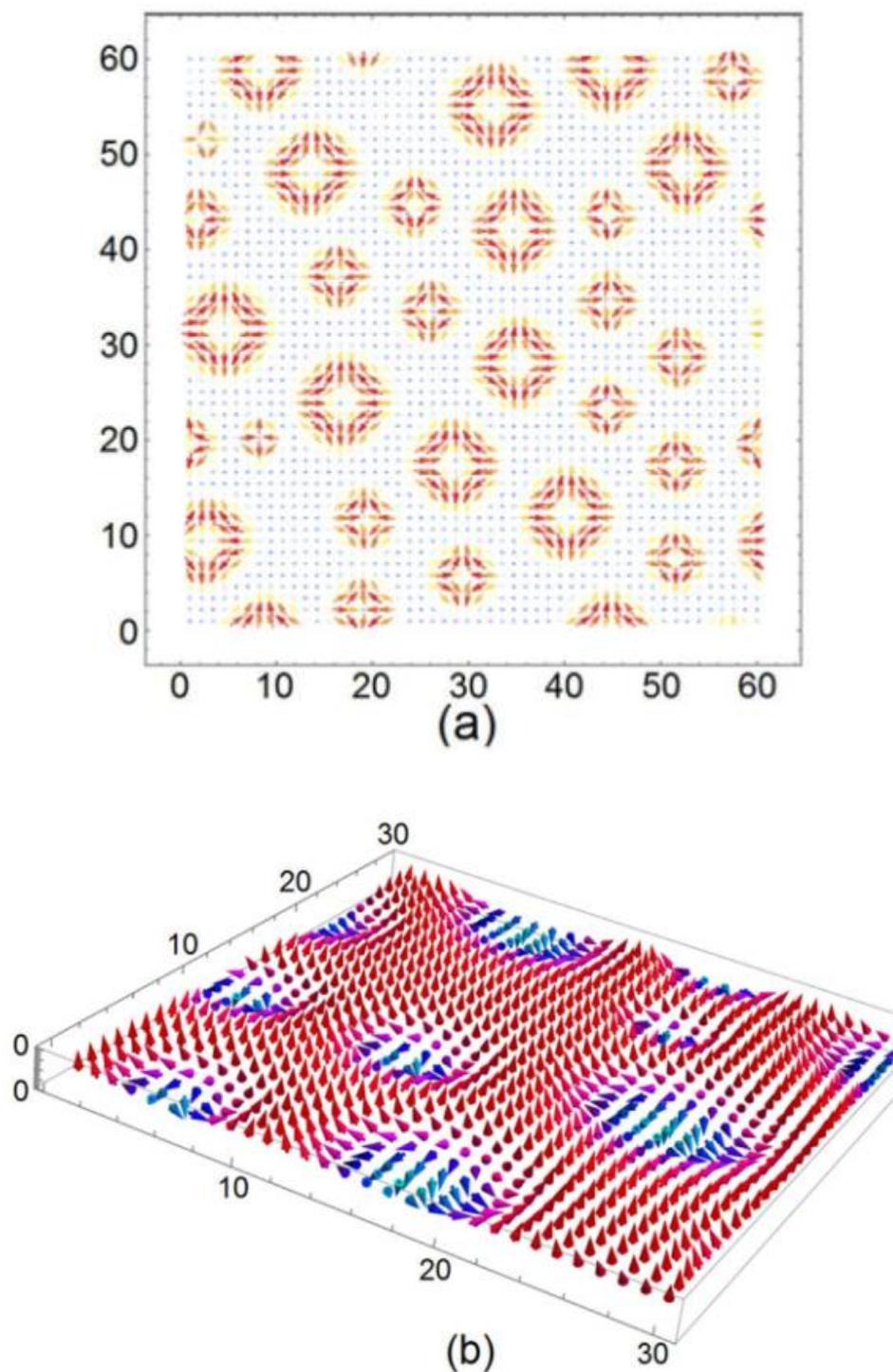


Рис. 3.5. Спиновые конфигурации основного состояния поверхностного слоя для (a)  $J^{mf} = -1.1$  и  $H = 0.2$ , (b) Трехмерная (3D) визуализация спиновой конфигурации основного состояния поверхностного слоя.

Видно, что на поверхностном и внутренних слоях магнитной пленки образуются скирмионы. Скирмионы формируются, в данном случае, при достаточно сильной интерфейсной связи и приложенного магнитного поля. Скирмионы распределены в трехмерном пространстве (не в плоскости) в магнитной пленке сверхрешетки. На рисунке 3.5 показан разрез в плоскости  $xu$ , поэтому проецируемые размеры не являются однородными, то есть обладают разным диаметром. Если выполним построение конфигурации основного состояния для сверхрешетки, состоящей из однослойной магнитной пленки, находящейся на сегнетоэлектрической пленке, то в этом случае скирмионы однородны на двумерной плоскости. Отметим, что скирмионы и антискирмионы не вырождаются из-за асимметричной формы магнитоэлектрического взаимодействия [см. формулу (3.7)]: выбирая направление вектора поляризации  $\mathbf{P}$ , мы фиксируем тем самым направление вращения скирмиона, т.е.  $[\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$ . Изменение направления вектора поляризации  $\mathbf{P}$  изменит структуру, то есть скирмионы на антискирмионы или наоборот.

На рисунке 3.6 показана конфигурация основного состояния интерфейсного магнитного слоя (вверху) для  $J^{mf} = -1.1$ , с внешним магнитным полем  $H = 0.33$ . В нижней части рисунка показаны конфигурации основного состояния второго (внутреннего) магнитного слоя. Скирмионы наблюдаются как на границе раздела, так и на внутренних магнитных слоях.

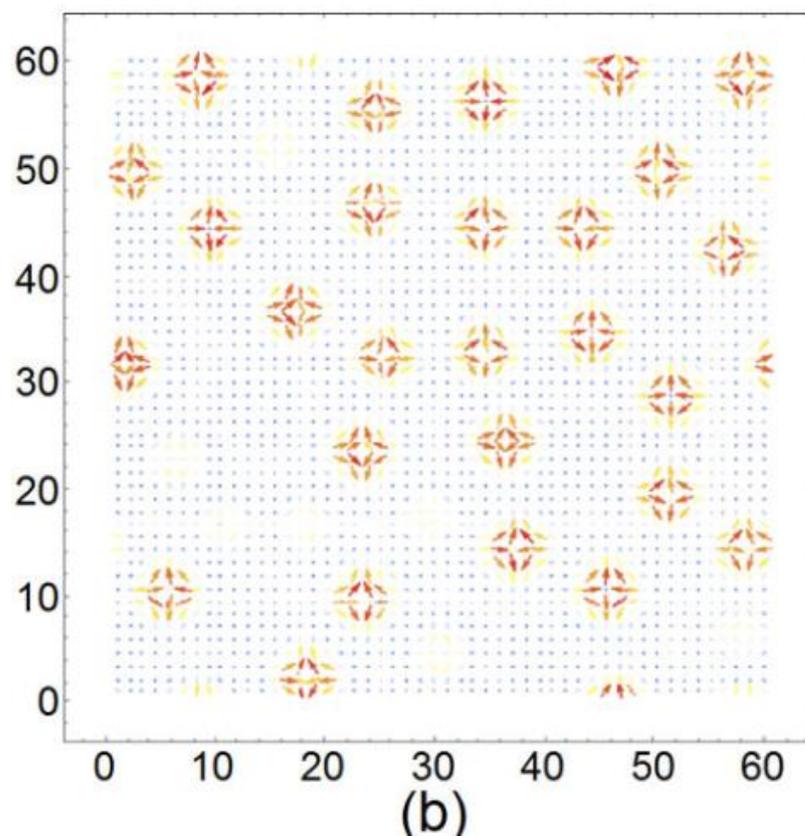
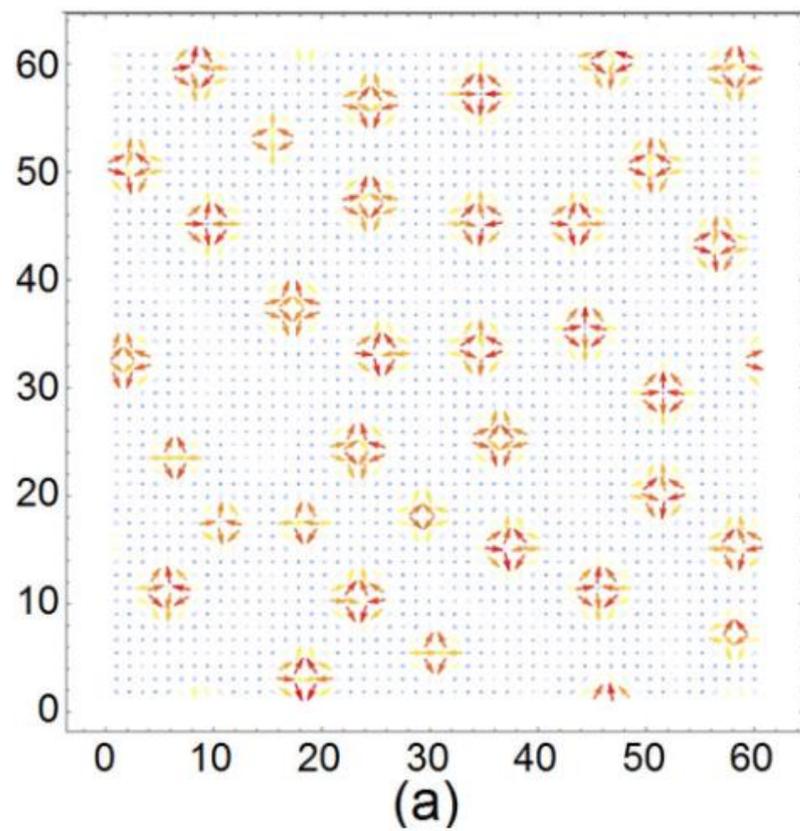


Рис. 3.6. Спиновые конфигурации основного состояния поверхностного слоя для (a)  $J^{mf} = -1.1$  и  $H = 0.33$ , (b) Спиновые конфигурации основного состояния внутреннего слоя.

На рисунке 3.7 показан трехмерная визуализация основного состояния для первого (интерфейсного) и второго (внутреннего) магнитного слоя для  $J^{mf} = -1.1$  и  $H = 0.33$ .

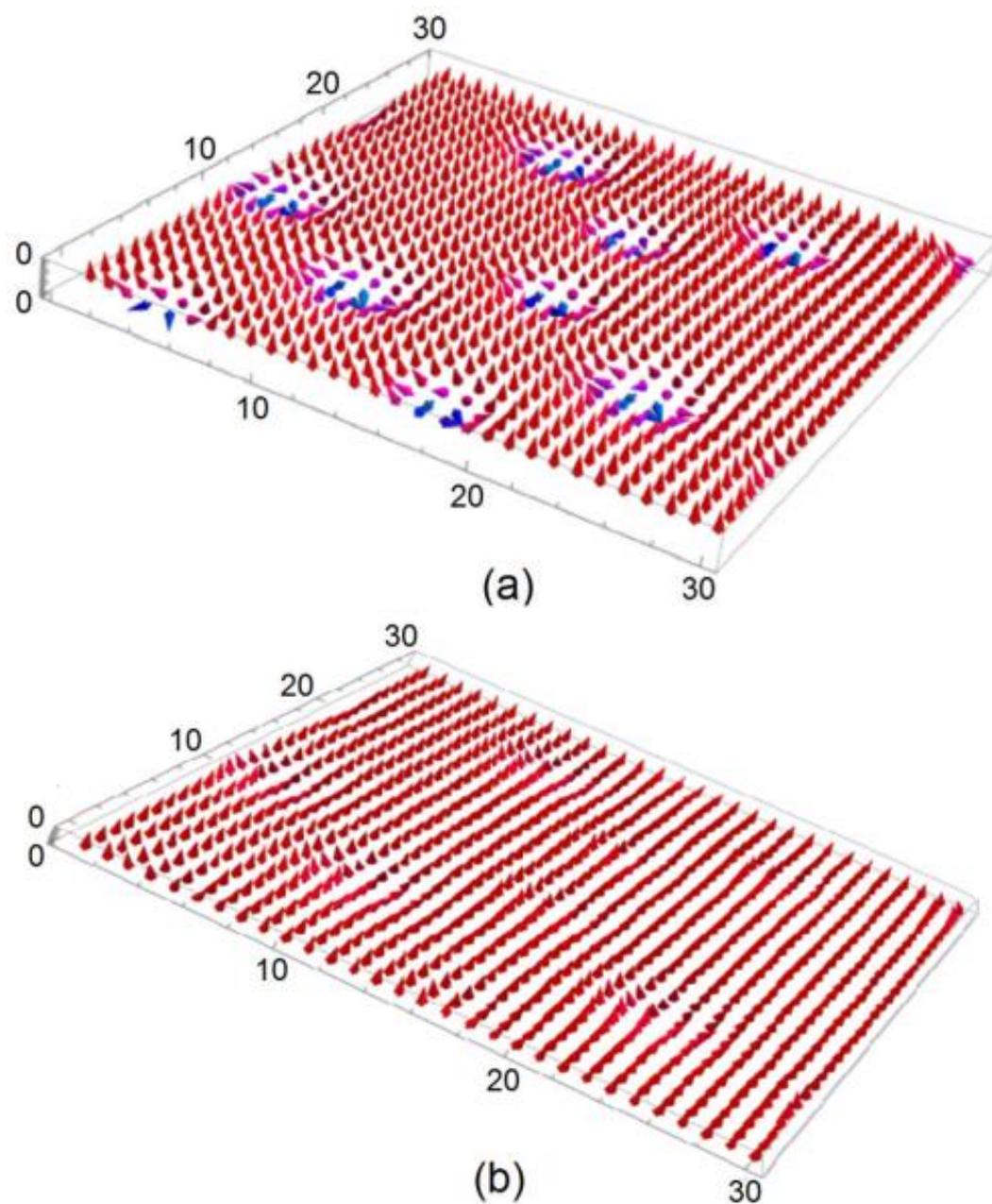


Рис. 3.7. Трехмерная визуализация основного состояния при  $J^{mf} = -1.1$  и  $H = 0.33$  поверхностного слоя (a) внутреннего слоя магнитной пленки (b).

Можно видеть, что скирмионы на поверхностном слое ярко выражены, но гораздо менее контрастные для внутреннего магнитного слоя. Для значений напряженности внешнего магнитного поля, больших чем  $H = 0.33$  скирмионы коллапсируют во внутренних слоях. В сильных полях все спины параллельны полю, поэтому скирмионы не образуются ни на поверхности, ни внутри магнитной пленки.

### § 3. Фазовые переходы в сверхрешетках и устойчивость основного скирмионного состояния

Для моделирования фазовых переходов и расчета динамики физических величин в зависимости от температуры в магнитоэлектрической сверхрешетке методами Монте-Карло используем алгоритм Метрополиса [30, 31]. В основном расчеты проводятся для системы с размерами  $N \times N \times L$ , где  $N = 40$  и толщина  $L = L_m + L_f = 8$  ( $L_m = 4$  магнитных слоя,  $L_f = 4$  сегнетоэлектрических слоя). Для достижения статистического равновесия на каждом узле алгоритм Метрополиса выполняет  $10^5$  Монте Карло шагов и  $10^5$  Монте-Карло итераций на каждом узле для выполнения усреднения.

Параметр порядка  $M_f(n)$  слоя  $n$  определяется как

$$M_f(n) = \frac{1}{N^2} \left\langle \left| \sum_{i \in n} P_i^z \right| \right\rangle \quad (3.11)$$

где под  $\langle \dots \rangle$  понимается статистическое среднее.

Параметр порядка для решетки магнитных скирмионов определяется не столь очевидным способом, в силу нелинейности структуры. Воспользуемся тем, что нам известно основное состояние, то есть спиновая конфигурация в момент времени  $t_0$  и при температуре  $T = 0$ . Определим параметр порядка как проекцию спина в данный момент времени  $t$  и при

температуре  $T$   $\vec{S}_i(T, t)$  на основное состояние спина на этом же узле  $\vec{S}_i^0(T = 0)$ :

$$M_m(n) = \frac{1}{N^2(t_a - t_0)} \sum_{i \in n} \left| \sum_{t=t_0}^{t_a} \vec{S}_i(T, t) \cdot \vec{S}_i^0(T = 0) \right| \quad (3.12)$$

здесь принято, что  $n$  – номер слоя магнитной пленки.

Параметр порядка магнитной скирмионной решетки  $M_m(n)$  близок к 1 при очень низкой  $T$ , при которой каждый из спинов при прецессии слабо отклоняется от своего основного состояния. И напротив,  $M_m(n)$  равен нулю, сильных флуктуациях от положения равновесия в парамагнитном состоянии. Такое определение параметра порядка аналогично способу задания параметра порядка Эдварда-Андерсона, который впервые был предложен для измерения степени спинового охлаждения в так называемых спиновых стеклах. Параметр порядка Эдварда-Андерсона определяется и рассчитывается следующим образом. Если спин заморожен, то его среднее по времени не равно нулю. Если спин испытывает сильные колебания с течением времени и с ростом температуры, то его значение среднего по времени равно нулю. Чтобы рассчитать общую степень замораживания, достаточно найти сумму квадрата среднего каждого спина по времени. При этом мы видим, что параметр порядка Эдварда-Андерсона выражает не характер упорядочения, а только степень замороженности.

В общем случае, когда основное состояние вырождено и может принять одну из нескольких конфигураций, таких как, например, все спины вниз или все спины вверх в ферромагнитной системе изинговских спинов, система выбирает одну возможную конфигурацию при  $T \rightarrow 0$ . Сосуществование нескольких фаз не допускается в неколлинеарном случае, потому что результирующая энергия выше, чем у чистой (из-за наличия доменных стенок). Однако во фрустрированных системах, в которых можно построить основное состояние

путем случайной сборки фрустрированных элементов, так как они не обладают дальним порядком.

Проследим за динамикой упорядочения системы от  $T = 0$ , поэтому мы должны сравнить конфигурацию при температуре  $T$  в момент времени  $t$  с конфигурацией основного состояния, исходя из которой осуществляется медленного нагрева системы при процедуре Монте-Карло моделирования.

Сравниваем фактическую конфигурацию, полученную при медленном нагреве с конфигурацией основного состояния, проецируя фактическую конфигурацию на выбранное основное состояние спина на этом же узле  $\vec{S}_i^0(T = 0)$  (см. уравнение (3.12)).

Возможны следующие варианты:

(i) если спиновая структура не стабильна, при  $T \neq 0$ , то  $M_m(n)$  со временем стремится к нулю, имеет место фазовый переход Березинского-Костерлица-Таулесса ( $XY$  - модель в двумерном случае с учетом взаимодействия ближайших соседних спинов);

(ii) если спиновая структура заморожена или упорядочена (спиновые стекла, ферромагнетики и т.д.), то  $M_m(n)$  не равен нулю при низких  $T$ .

В рассматриваемом структуре скирмионов, мы имеем дело со вторым случаем, а именно спиновая конфигурация основного состояния остается стабильной до конечной температуры  $T$ .

Если во время моделирования система совершает «глобальное вращение», то  $\sum_{t=t_0}^{t_a} \vec{S}_i(T, t) \cdot \vec{S}_i^0(T = 0) = 0$  при усреднении по длительным временным промежуткам. Но продолжительность этого времени зависит от характера упорядочения и размера системы, используемой при моделировании. Для больших неупорядоченных систем, таких как спиновые стекла, и сложных неколлинеарных протяженных скирмионных структур, глобальное вращение может быть запрещено, или время, чтобы достигнуть его, недостижимо при моделировании методами Монте-Карло. Чтобы понять, реализуется глобаль-

ное вращение или нет, необходимо выполнить масштабирование по конечному времени, чтобы вывести свойства при бесконечном времени расчета. По смыслу это очень похоже на масштабирование конечного размера, используемое для определения свойств кристалла с «бесконечными» размерами.

Ранее было выполнено масштабирование по времени для двумерного кристалла скирмиона [36]. В этой работе использовался аналогичное (3.12) выражение для параметра порядка. Показано, что двумерным скирмионам нужно намного больше, чем  $10^6$  Монте-Карло итераций на спин, чтобы достичь состояния термодинамического равновесия. Параметр порядка следует растянуть экспоненциальному закону, как в случае спиновых стекол, и стабилизируется при ненулевых значениях  $M_m(n)$  для  $T < T_c$  при стремящимся к бесконечности времени. Если бы было глобальное вращение, мы бы не наблюдали ненулевых значений  $M_m(n)$  для  $T < T_c$  при стремящимся к бесконечности времени. Отметим, что в данной работе, как в работе [36], предпринимается очень плавный нагрев выбранного основного состояния и не наблюдается глобального вращения.

Подчеркнем, что подсчет топологических зарядов вокруг каждого скирмиона численно возможен. В этом случае топологический заряд возрастает с ростом  $T$  и стремится к нулю при фазовом переходе. Процедура эквивалентна проекции спиновой текстуры скирмиона на его основное состояние. Общие параметры порядка магнитной  $M_m(n)$  и сегнетоэлектрической подсистем  $M_f(n)$  определяются суммированием по числу слоев.

$$M_m = \sum_n M_m(n)$$

$$M_f = \sum_n M_f(n)$$

На рис. 3.8 показана зависимость энергии магнитной пленки от температуры при отсутствии внешнего магнитного поля для различных значений магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела: на рис. 3.8 (а) для слабого магнитоэлектрического взаимодействия при значениях  $J^{mf} =$

$-0.1$ ,  $J^{mf} = -0.125$ ,  $J^{mf} = -0.15$ ,  $J^{mf} = -0.2$ , а на рис. 9 (b) для более сильных значений  $J^{mf} = -0.45$ ,  $J^{mf} = -0.75$ ,  $J^{mf} = -0.85$ ,  $J^{mf} = -1.2$ .

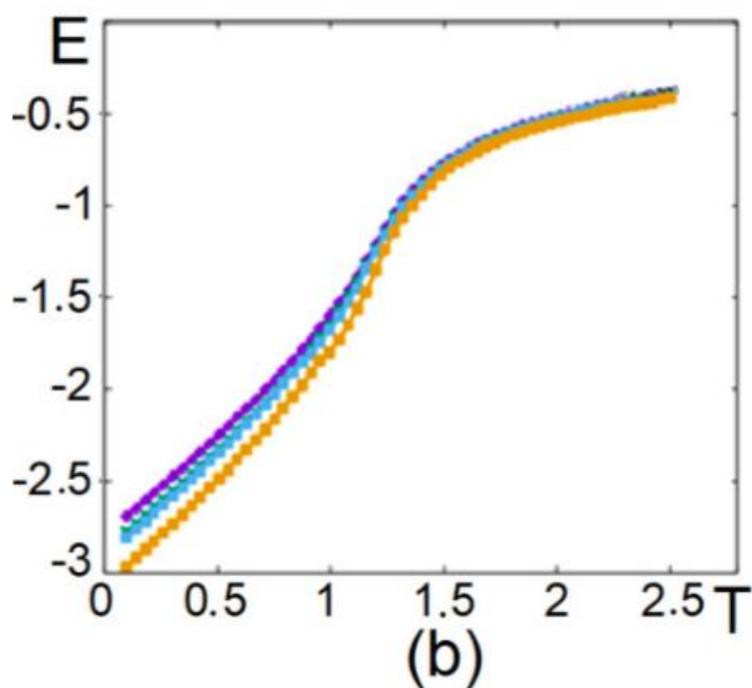
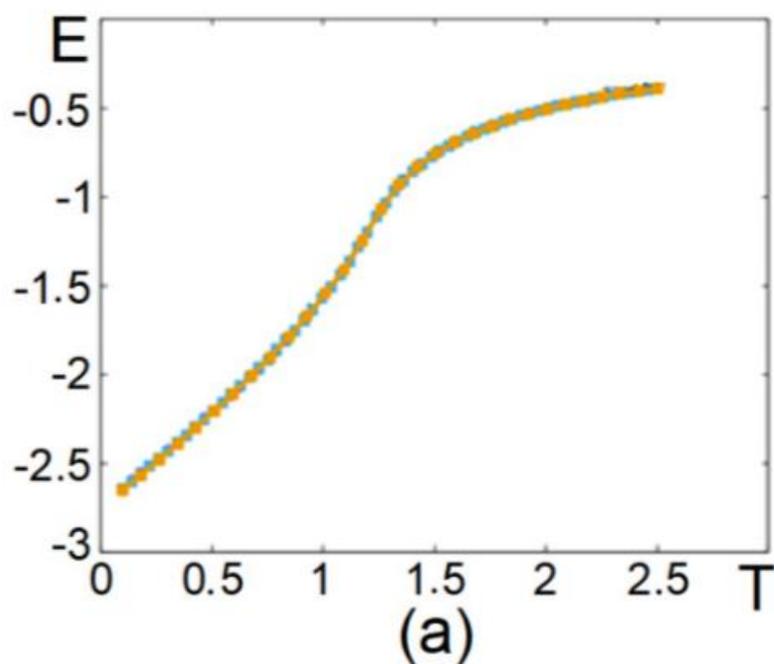


Рис. 3.8. Зависимость энергии магнитной пленки от температуры  $T$  для (a)  $J^{mf} = -0.1$ ,  $J^{mf} = -0.125$ ,  $J^{mf} = -0.15$ ,  $J^{mf} = -0.2$ . Все 4 графики совпадают, (b)  $J^{mf} = -0.45$  (фиолетовый цвет),  $J^{mf} = -0.75$  (зеленый),  $J^{mf} = -0.85$  (голубой),  $J^{mf} = -1.2$  (желтый цвет). Принято, что  $H = 0$ .

Как уже было сказано, при определении основного состояния, при малых значениях параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$ , конфигурация основного состояния образует большие ферромагнитные домены на интерфейсе (см. Рис. 3.2). Внутренние слои остаются ферромагнитными. Поэтому зависимость энергии от температуры не чувствительна к слабым отклонениям  $J^{mf}$ , что подтверждается рис. 3.8 (а). Фазовый переход происходит при изменении хода кривой, что соответствует максимуму функции теплоемкости от температуры  $T_C^m \cong 1.25$ . Следует отметить что при  $T = 0$  энергия магнитной пленки принимает значение  $E^m = -2.75$ . Это значение определяется суммой энергии спинов вдоль слоя: 2 спина на внутренних слоях с 6 ближайшими соседями и 2 интерфейсных спина с 5 ближайшими взаимодействующими спинами. И энергия спина в ферромагнитном состоянии при  $T = 0$  есть

$$E^m = -\frac{(2 \times 6 + 2 \times 5)}{(4 \times 2)} = -2.75$$

Множитель в знаменателе вводится для того, что избежать двойного подсчета, границ пленки.

Кривые на рисунке 3.8 (b), построенные для более высоких значений параметра  $J^{mf}$ , указывают на отклонение от ферромагнитного состояния вследствие того, что спиновая конфигурация на интерфейсе становится все более неколлинеарной. Тем не менее можно наблюдать магнитные фазовые переходы, которым система подвержена практически при одинаковой температуре  $T_C^m \cong 1.25$ , для любых из указанных  $J^{mf}$ . Это говорит о том, что спины во ферромагнитное взаимодействие спинов во внутренних слоях доминирует при упорядочении.

На рис. 3.9 показаны температурные зависимости параметры порядка магнитной  $M_m$  и сегнетоэлектрической  $M_f$  пленок для различных значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} = -0.1$ ,  $J^{mf} = -0.125$ ,  $J^{mf} = -0.15$ ,  $J^{mf} = -0.2$  без внешнего магнитного поля.

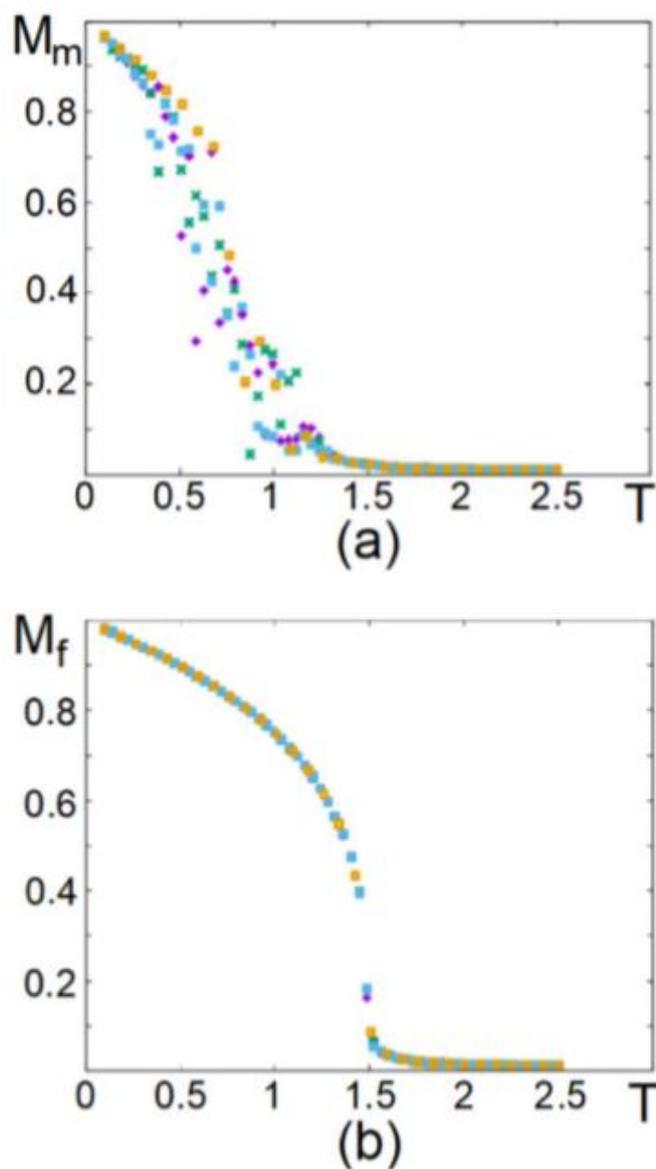


Рис. 3.9. Зависимость параметра порядка магнитной пленки (a) и сегнетоэлектрической пленки (b) от температуры  $T$  для  $J^{mf} = -0.1$  (фиолетовые точки),  $J^{mf} = -0.125$  (зеленый цвет),  $J^{mf} = -0.15$  (голубой цвет),  $J^{mf} = -0.2$  (желтый цвет). Принято, что  $H = 0$ .

Некоторые комментарий к графикам на рис. 3.9.

- i) Для магнитной пленки  $M_m$  подвержен сильным флуктуациям, но как видно из рис. 3.9 (a) все графики демонстрируют резкое снижение до нулевых значений параметра порядка при  $T_c^m \cong 1.25$ . Наблюдаемые

флуктуации происходят, во-первых, из-за структуры спиновых конфигураций на поверхности, и во-вторых из-за самой природы Гейзенберговских спинов в низкоразмерных системах [34].

- ii) Для сегнетоэлектрической пленки сверхрешетки поведение  $M_f(T)$  гладкое, без флуктуаций параметра порядка, что связано с Изинговской природой для  $z$ -компонент векторов электрических поляризации. Сегнетоэлектрическая пленка претерпевает фазовый переход при  $T_C^f \cong 1.50$ .
- iii) Таким образом, в сверхрешетке происходят два независимых фазовых перехода, один магнитный и один сегнетоэлектрический. Магнитный переход происходит при более низкой температуре. Известно, что в объемных кристаллах температура перехода приблизительно пропорциональна  $1/n$ , где  $n$  – число спиновых степеней свободы:  $n = 3$  для Гейзенберговского спина,  $n = 1$  для Изинговского спина [37, 38]. Поэтому фазовые переходы в сегнетоэлектрической пленке происходят при более высокой температуре, что и наблюдается на рис. 3.9 (b). Слабая взаимосвязь с магнитной пленкой приводит к двум разным температурам перехода. В температурном интервале между  $T_C^m$  и  $T_C^f$  сверхрешетка частично разупорядочена: магнитная пленка находится в парамагнитной (неупорядоченной) фазе, а в сегнетоэлектрической пленке переход типа порядок-беспорядок ещё не произошел. Такой частичный беспорядок наблюдался во многих системах, например, на поверхности тонкой пленки дальний порядок может разрушиться при более низкой температуре, пока внутренние слои пленки все еще являются упорядоченными [98]. В этой связи можно также упомянуть частичный фазовый переход, которому подвержены гелиомагнитные тонкие пленки в постоянном внешнем магнитном поле [29].

На рис. 3.10 показаны температурные зависимости параметры порядка магнитной  $M_m$  и сегнетоэлектрической  $M_f$  пленок для умеренных значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия без учета действия внешнего магнитного поля.

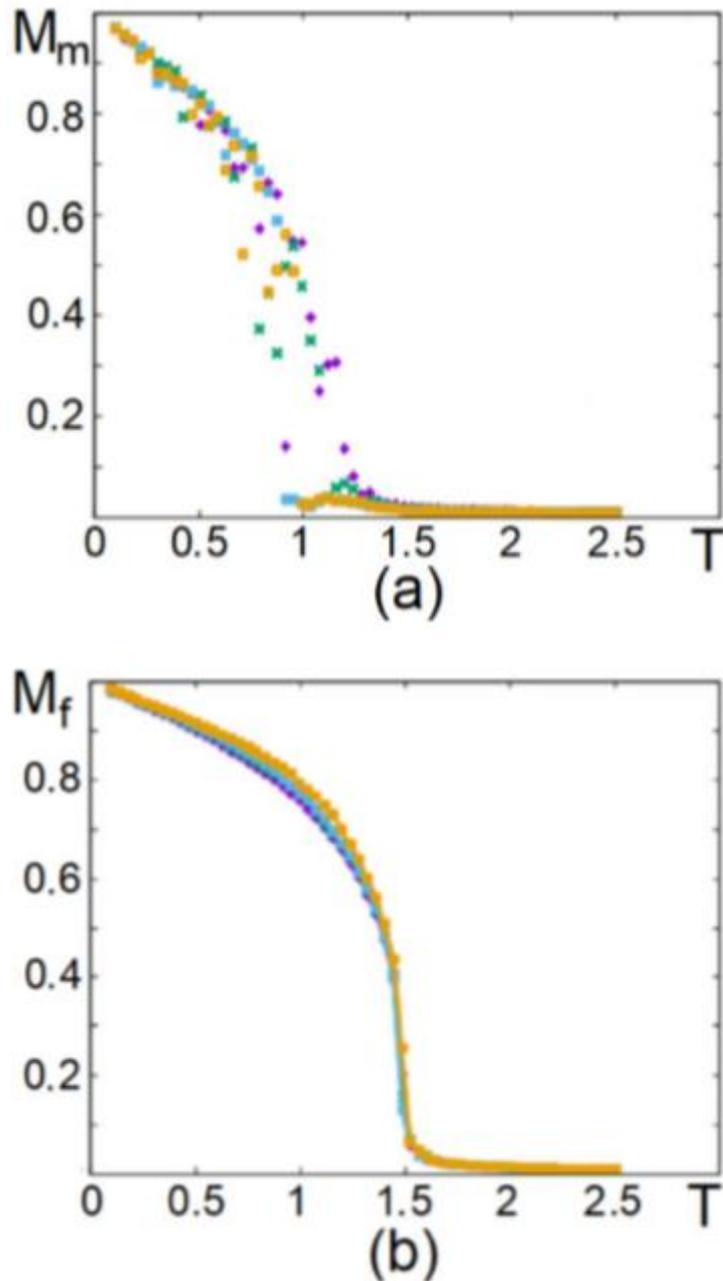


Рис. 3.10. Зависимость параметра порядка магнитной пленки (a) и сегнетоэлектрической пленки (b) от температуры  $T$  для  $J^{mf} = -0.1$  (фиолетовые точки),  $J^{mf} = -0.125$  (зеленый цвет),  $J^{mf} = -0.15$  (голубой цвет),  $J^{mf} = -0.2$  (желтый цвет). Принято, что  $H = 0$ .

Из приведенных графиков, можно сделать вывод о том, что чем сильнее  $|J^{mf}|$ , тем меньше становится  $T_C^m$ . Этот результат Монте-Карло моделирования подтверждает соотношение (3.10) которое мы получили при минимизации энергии однослойной магнитной пленки, находящейся на сегнетоэлектрической пленке

$$\theta = \arctan\left(-\frac{2J^{mf}}{J^m}\right)$$

Чем больше величина  $|J^{mf}|$  тем большим становится угол  $\theta$ . В случае наличия нескольких магнитных слоев, (этот случай и показан на рис. 3.10), большой угол вызывает и как следствие более сильную конкуренцию магнитоэлектрического взаимодействия с коллинеарным ферромагнитным взаимодействием внутри слоев. Эта усиленная конкуренция приводит к разрушению дальнего магнитного порядка и фазовому переходу типа порядок-беспорядок при более низкой температуре.

Рассмотрим влияние внешнего магнитного поля на баланс конкуренций рассматриваемых взаимодействий в сверхрешетке. На рисунке 3.11 показаны графики функций параметра порядка и энергия магнитной пленки в зависимости от  $T$  для различных значений внешнего магнитного поля. Межпленочное магнитоэлектрическое взаимодействие имеет значение  $J^{mf} = -1.2$ .

В зависимости от величины напряженности внешнего магнитного поля неколлинеарная спиновая конфигурация сохраняется в интервале температур от 0.5 до 1.0 (для  $H = 0$ ). После фазового перехода спины выравниваются в направлении поля, что приводит к ненулевым значениям параметра порядка после перехода (рис. 3.11a). В зависимости энергии от температуры можно увидеть резкое изменение хода кривой только для случая когда  $H = 0$ , это значит, что и удельная теплоемкость является имеет резкий максимум только для  $H = 0$  и пик теплоемкости расширяется с увеличением  $H$ .

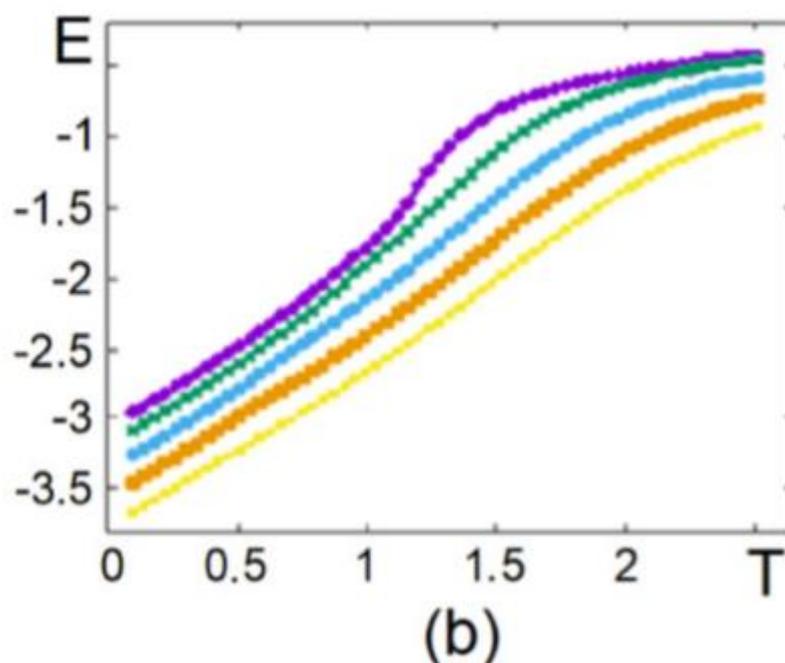
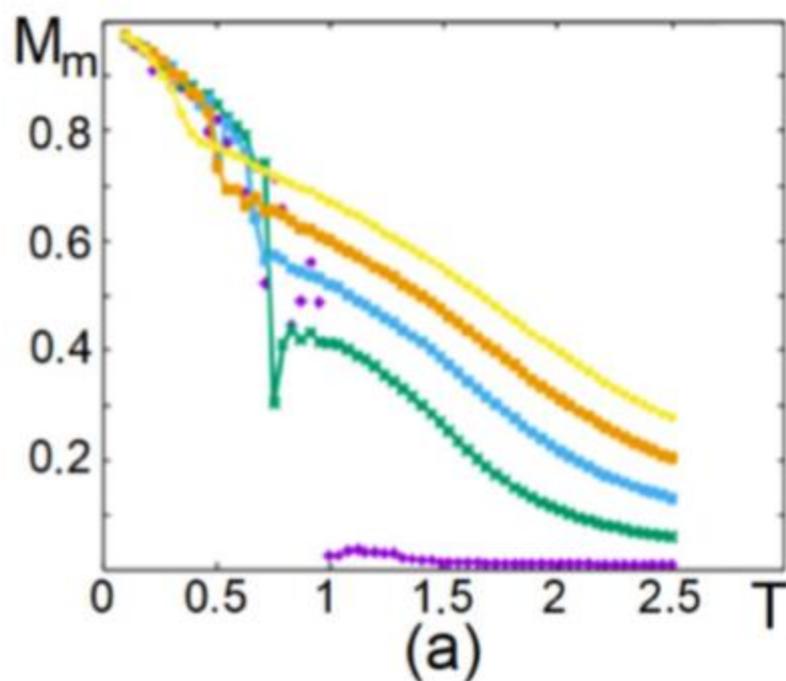


Рис. 3.11. Зависимость параметра порядка (a) и энергии магнитной пленки (b) от температуры  $T$  для  $H = 0$  (фиолетовые точки),  $H = 0.25$  (зеленый цвет),  $H = 0.5$  (голубой цвет),  $H = 0.75$  (желтый цвет). Параметр магнитоэлектрического взаимодействия на границе магнитной и сегнетоэлектрической пленки  $J^{mf} = -1.20$ .

Рассмотрим частный случай очень сильных интерфейсных связей. На рисунке 3.12 (a) изображена зависимость магнитного параметра порядка от  $T$ .

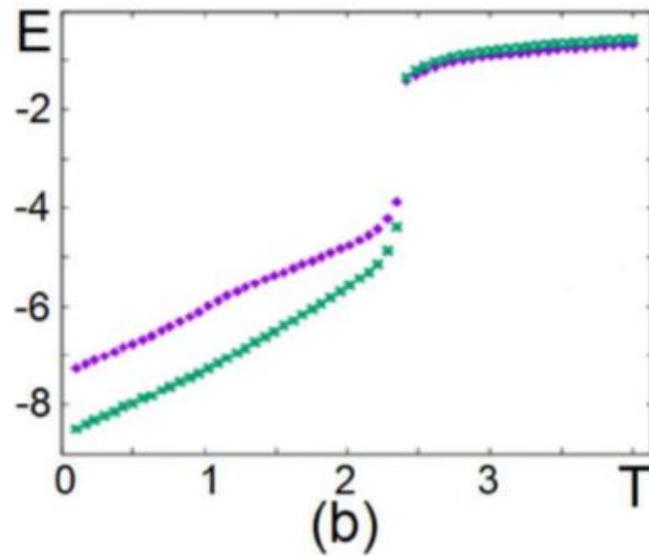
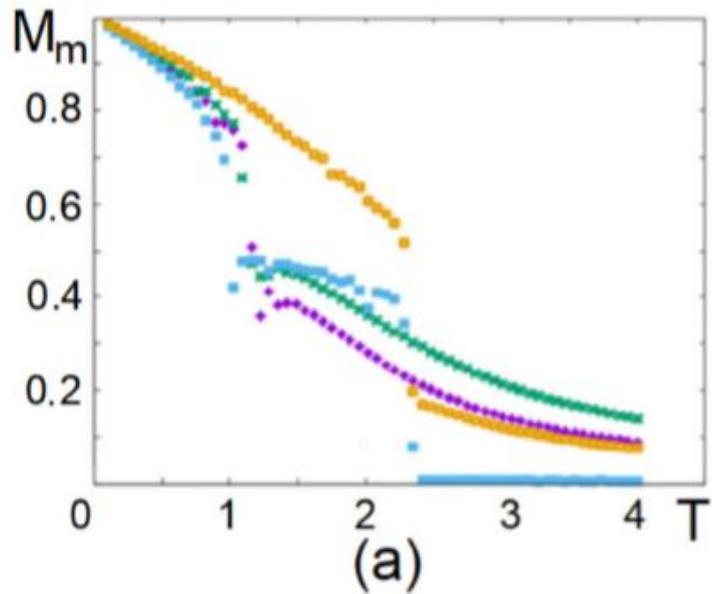


Рис. 3.12. (a) Зависимость параметра порядка магнитной пленки от температуры  $T$ . Фиолетовые точки соответствуют ( $J^{mf} = -2.5, H^z = 1$ ), зеленый цвет - ( $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.5$ ), голубой цвет - ( $J^{mf} = -6.0, H^z = 1$ ), желтые точки - ( $J^{mf} = -6.0, H^z = 0$ ), (b) Энергии магнитной (фиолетовый цвет) и сегнетоэлектрической пленок (зеленый) в зависимости от  $T$  для случая ( $J^{mf} = -6.0, H^z = 0$ ).

Фиолетовая и зеленая линии соответствуют  $M$  для  $J^{mf} = -2.5$ , при  $H^z = 1$  и  $H^z = 1.5$  соответственно; синий и желтый цвет соответствуют  $M$  для  $J^{mf} = -6.0$  с  $H^z = 0$  и  $H^z = 1.0$ . Графики зависимостей параметра порядка

магнитной пленки от температуры указывают на то, что при больших значениях  $J^{mf}$  в магнитной пленке происходят фазовые переходы первого рода при  $T_C^m = 1.05$  для ( $J^{mf} = -2.5, H^z = 1$ ) (фиолетовый график), при  $T_C^m = 1.12$  для ( $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.5$ ) (зеленый график) и при  $T_C^m = 1.25$  для ( $J^{mf} = -6, H^z = 1$ ) (голубой график). В случае отсутствия внешнего магнитного поля, а именно для частного случая ( $J^{mf} = -6.0, H^z = 0$ ) (желтый график), фазовый переход первого рода происходит при  $T_C^m = 1.05$ .

Остановимся на природе перехода, показанного на рис. 3.12 (а). В случае наличия внешнего магнитного поля, первый фазовый переход при низкой температуре ( $T \sim 1.05 - 1.25$ ) обусловлен разрушением скирмионной магнитной структуры. После этого перехода  $z$ -компоненты векторов спина, не являющиеся нулевыми при воздействии внешнего поля, стремятся к нулю только при высоких  $T \approx 2.3$ . Это резкое уменьшение параметра порядка не является индикацией фазового перехода, в силу того, что  $z$ -компоненты векторов спина никогда не будут равны нулю во внешнем поле, если нет сильного магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе магнитной пленки (при не слишком больших значениях  $J^{mf}$ ). Когда действует сильное магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе ( $J^{mf} = -6.0$ , синий график данных), что спины будут лежать в плоскости  $xу$ , несмотря на внешнее магнитное поле. Видно, что  $z$ -компоненты векторов спина обращаются в ноль после фазового перехода в сегнетоэлектрической пленке, то есть потери сегнетоэлектрического упорядочения при  $T \approx 2.3$ . Обратим внимание, что при  $H = 0$  (желтый график), на интерфейсе не формируются скирмионы и спиновая конфигурация является киральной (спиральной). Одиночный фазовый переход в парамагнитную фазу происходит при  $T \approx 2.3$ , когда происходит одновременное разрушение кирального магнитного и коллинеарного сегнетоэлектрического упорядочения (см. Рис. 3.12 (b)).

На рис. 3.12 (b) изображены энергии магнитной (фиолетовая) и сегнетоэлектрической (зеленая) пленки в зависимости от температуры для ( $J^{mf} =$

$-6.0, H^z = 0$ ). Видно, разрывы в обеих кривых происходят при одинаковой температуре  $T_c \approx 2.3$ , это указывает на происходящие фазовые переходы первого рода как для магнитной, так и для сегнетоэлектрической подсистем при одной и той же температуре. Фактически, при такой сильной магнитоэлектрической связи фазовые переходы как в магнитной, так и в сегнетоэлектрической подсистемах управляются интерфейсом, это объясняет одинаковую температуру перехода для них.

Происходящий в сверхрешетке переход первого рода объясняется тем, что рассматриваемая система является фрустрированной из-за наличия сильных конкурирующих взаимодействий. Недавно было показано, что во всех фрустрированных неколлинеарных спиновых системах возможны фазовые переходы первого рода [101].

Рассмотрим влияние внешнего электрического поля, приложенного перпендикулярно плоскости слоев сверхрешетки. Для сегнетоэлектрической подсистема вектора поляризации расположены вдоль оси  $z$ , так что приложенное электрическое поле  $E$  вдоль этого же направления препятствует существованию фазовых превращений из сегнетоэлектрической фазы в параэлектрическую. Этот вывод подтверждают графики, изображенные на рисунке 3.13.

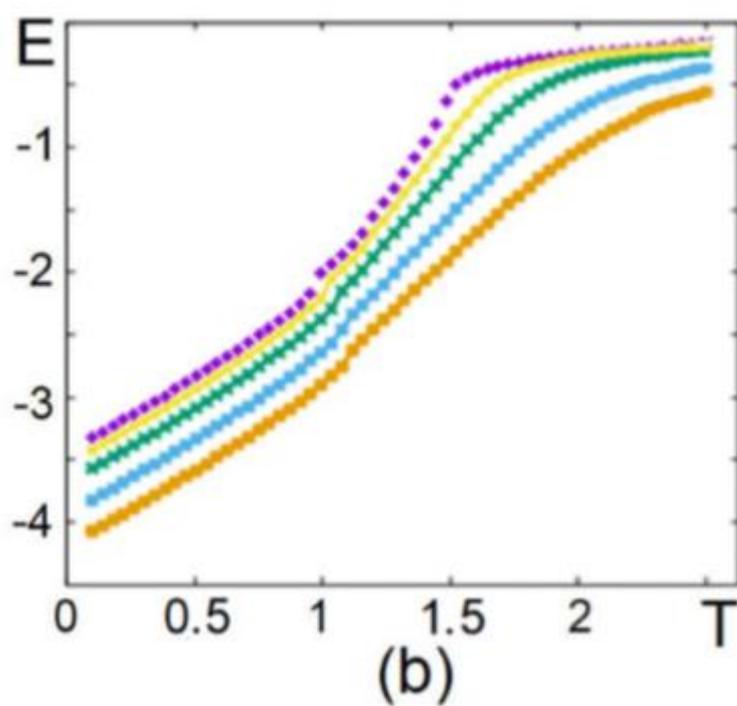
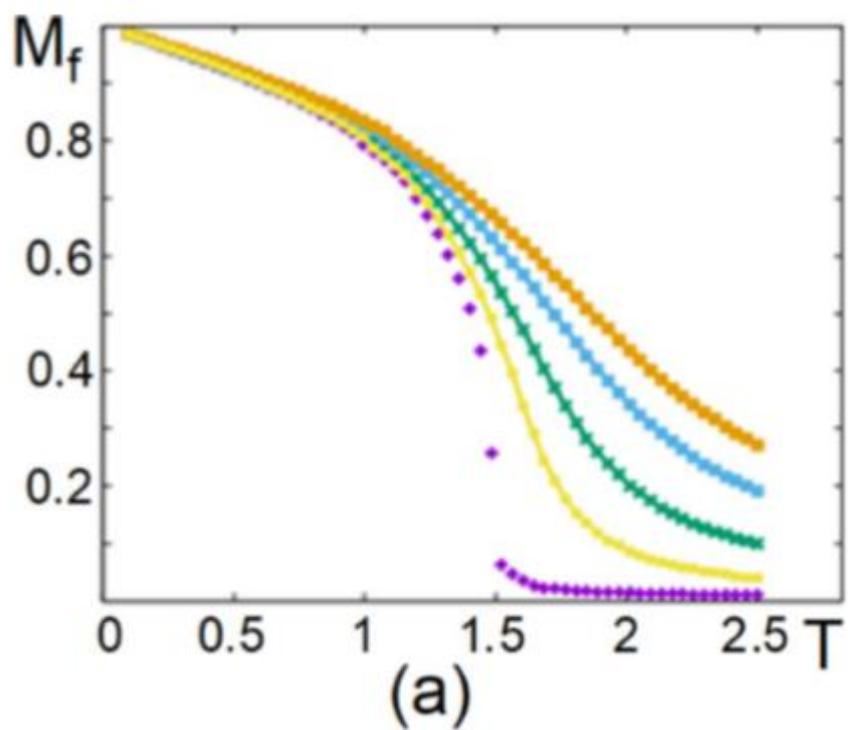


Рис. 3.13. Зависимость параметра порядка (а) и энергии сегнетоэлектрической пленки (b) от температуры  $T$ . Фиолетовый график соответствуют  $E = 0$ , зеленый цвет -  $E = 0.25$ , голубой цвет  $E = 0.5$ , желтый -  $E = 1$ . Параметр магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе принят  $J^{mf} = -1.2$ .

Отметим тот факт, что параметр порядка никогда не принимает нулевых значений при  $E^z \neq 0$ , аналогично случаю ферромагнетика в приложенном магнитном поле. Из рисунка 3.13 (b) следует, что график температурной зависимости энергии испытывает резкий скачок или резкое изменение кривизны при  $E^z = 0$ , что указывает на происходящий фазовый переход. Другие графики  $E(T)$  при  $E^z \neq 0$  не обнаруживают фазовых переходов. Можно заметить некоторые аномалии при  $T \sim 1 - 1.1$ , которые обусловлены действием фазового перехода в магнитной подсистеме в этом интервале температур.

#### § 4. Выводы к главе

В главе мы рассмотрели новую модель магнитоэлектрической связи между магнитной пленкой и сегнетоэлектрической пленкой в сверхрешетке. Эта связь имеет вид кирального магнитоэлектрического взаимодействия между дипольным моментом сегнетоэлектрической пленки и спинами в плоскости магнитной пленки на границе раздела сверхрешетки мультиферроика. Исследование с помощью метода наискорейшего спуска, состоящего в минимизации энергии сверхрешетки обнаруживает однородные неколлинеарные спиновые конфигурации в отсутствие внешнего магнитного поля и переход таких конфигураций в скирмионы в приложенном магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости пленки.

Моделирование по методу Монте-Карло выполнено для исследования фазовых переходов, происходящих в сверхрешетке с учетом и без учета внешних электрического и магнитного полей. Показано, что скирмионы могут быть стабильны при ненулевых температурах.

Показано впервые, что тип фазового перехода может быть второго или первого порядка, в зависимости от параметра связи на интерфейсе сверхрешетки. Существование скирмионов в многослойных сверхрешетках ограниченных магнито-сегнетоэлектрической границей, является принципиально новым явлением. Обнаруженный эффект может быть использован в транспортных приложениях в устройствах спинтроники, отдельные из которых отмечены ранее во введении.

## Глава 4. Элементарные возбуждения в сверхрешетке в отсутствии внешнего магнитного поля

### § 1. Введение

В предыдущей главе рассмотрены результаты математического моделирования методами Монте-Карло для фазовых переходов в сверхрешетке ферромагнетик/сегнетоэлектрик с киральным магнитоэлектрическим взаимодействием типа Дзялошинского-Мории между магнитной и сегнетоэлектрической пленкой. В этой главе рассмотрим особенности спектра спиновых волн, возбуждаемых в ферромагнитной пленке в отсутствии внешнего магнитного поля, в некоторых частных случаях.

Воспользуемся методом двухвременных температурных функций Грина, разработанный академиком Боголюбовым [1] развит в работах Тябликова [2], Боголюбова Н.Н. (мл.) и Садовникова Б.И. [3]. Метод функций Грина эффективен для исследования низкотемпературных свойств квантовых спиновых систем (гелиомагнетиков) и двумерных пленок, с взаимодействием Дзялошинского-Мории [98, 220]. В этой главе будет развит метод двухвременных функций Грина для тонких пленок сверхрешеток мультиферроиков с неколлинеарной спиновой конфигурацией в магнитной подсистеме. При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации, выполненные автором лично или в соавторстве, в которых согласно положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [173, 210, 220, 224]. Авторский вклад заключался в участии в постановке задач, построении модели, выполнении аналитических расчетов, обсуждении результатов и подготовке статей в перечисленных публикациях.

## § 2. Модель сверхрешетки с магнитной анизотропией

Гамильтониан сверхрешетки выберем в том же виде, что и в предыдущей главе (уравнения (4.4) - (4.10)), повторим их здесь для удобства

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (4.1)$$

где  $H_m$  и  $H_f$  - гамильтонианы ферромагнитной и сегнетоэлектрической пленок соответственно, а  $H_{mf}$  - гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух соседних пленок. Опишем гамильтониан магнитной пленки с помощью спиновой модели Гейзенберга на простой кубической решетке:

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (4.2)$$

где  $\vec{S}_i$  - оператор спина на  $i$ -м узле решетки,  $|\vec{S}_i| = 1/2$ , в отличие от предыдущей главы, где считалось, что  $\vec{S}_i$  является классическим Гейзенберговским спином  $\vec{S}_i$  на узле, с амплитудой  $|\vec{S}_i| = 1$ .  $\vec{H}$  - внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости пленки вдоль оси  $z$ . Для сегнетоэлектрической подсистемы, для простоты, мы предполагаем, что электрические поляризации являются операторами поляризации. Гамильтониан подсистемы зададим в виде

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_i E^z \cdot P_i^z \quad (4.3)$$

где  $\vec{P}_i$  - оператор дипольной поляризации  $i$ -го узле простой кубической решетки.

Гамильтониан для магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух пленок зададим в виде

$$\begin{aligned} H_{mf} &= \sum_{i,j,k} J^{mf} P_k(\vec{R} \times \vec{r}_{i,j}) \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \\ &= \sum_{i,j,k} J^{mf} P_k e_{i,j} \vec{z} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \end{aligned}$$

$$= \sum_{i,j,k} J^{mf} e_{i,j} \vec{P}_k \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \quad (4.4)$$

В главе 3 было показано, что спины на интерфейсном слое магнитной пленки, располагаются в  $xu$  – плоскости, следовательно при квантово-механических расчетах следует учесть, что на интерфейсном слое сверхрешетки мультиферроика ось квантования каждого из спинов лежит в плоскости  $xu$

Обозначим в качестве оси квантования ось  $\zeta$  (см. Рис. 4.15).

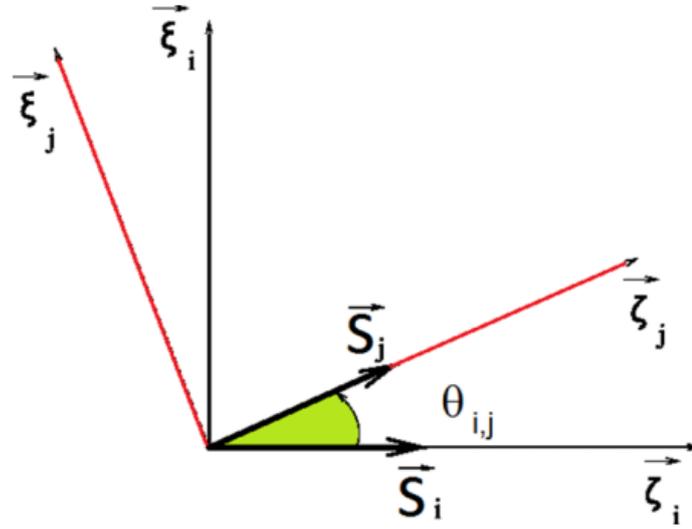


Рис. 4.15. Оси квантования в  $xu$  – плоскости спинов  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$  есть оси  $\hat{\zeta}_i$  и  $\hat{\zeta}_j$  соответственно.

Выразим спины в локальных координатах, тогда можно записать

$$\vec{S}_i = S_i^{\xi_i} \hat{\xi}_i + S_i^{\eta_i} \hat{\eta}_i + S_i^{\zeta_i} \hat{\zeta}_i \quad (4.5)$$

$$\vec{S}_j = S_j^{\xi_j} \hat{\xi}_j + S_j^{\eta_j} \hat{\eta}_j + S_j^{\zeta_j} \hat{\zeta}_j \quad (4.6)$$

где координаты узлов  $i$  –го и  $j$  –спинов связаны преобразованием вращения координат

$$\begin{aligned} \hat{\xi}_j &= \cos \theta_{i,j} \hat{\zeta}_i + \sin \theta_{i,j} \hat{\xi}_i \\ \hat{\zeta}_j &= -\sin \theta_{i,j} \hat{\zeta}_i + \cos \theta_{i,j} \hat{\xi}_i \\ \hat{\eta}_j &= \hat{\eta}_i \end{aligned}$$

Здесь  $\theta_{i,j} = \theta_i - \theta_j$  – угол между направлениями спинов  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ .

Как уже было показано в главе 3, спиновая конфигурация основного состояния для атомарного слоя неколлинеарна с определенной периодичностью. Для двухслойной магнитной пленки спиновые конфигурации в двух слоях идентичны из соображений симметрии. Однако при толщине магнитной пленки более двух слоев, спины во внутренних слоях расположены друг к другу под углами, отличающимися от углов направлений соседних спинов на интерфейсе, где обменное взаимодействие конкурирует с магнитоэлектрической связью.

Не будем подробно останавливаться на анализе этого вопроса, хотя это можно сделать, используя метод, предложенный в [98]. Рассмотрим подробнее случай сверхрешетки, состоящей из однослойной магнитной и сегнетоэлектрической пленки с киральной магнитоэлектрической связью (4.4).

Предположим, что спин полуцелый,  $S = 1/2$ . Выразим полный гамильтониан магнитного слоя

$$H_M = H_m + H_{mf}$$

в терминах локальных координат.

Выразим  $\vec{S}_j$  в координатах  $(\hat{\xi}_i, \hat{\zeta}_i, \hat{\eta}_i)$ , получим следующее выражение для гамильтониана однослойной магнитной пленки, связанной с сегнетоэлектрической пленкой в сверхрешетке

$$\begin{aligned} H_M = & - \sum_{\langle i,j \rangle} J^m \left\{ \frac{1}{4} (\cos \theta_{i,j} - 1) (S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-) \right. \\ & + \frac{1}{4} (\cos \theta_{i,j} + 1) (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \\ & + \frac{1}{2} \sin \theta_{i,j} (S_i^+ + S_i^-) S_j^z - \frac{1}{2} \sin \theta_{i,j} S_i^z (S_j^+ + S_j^-) \\ & \left. \cos \theta_{i,j} S_i^z S_j^z \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{J^{mf} P^z}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} [(S_i^+ + S_i^-)(S_j^+ + S_j^-) |\sin \theta_{i,j}| \\
& + 4S_i^z S_j^z |\sin \theta_{i,j}|]. \tag{4.16}
\end{aligned}$$

Отметим, что в основном состоянии  $P^z = 1$ . Но при ненулевых температурах заменяем  $P^z$  его средним значением  $\langle P^z \rangle$ , причем усреднение берется по каноническому распределению с гамильтонианом  $H_M$ . В соотношении (4.16) для простоты использовались стандартные обозначения операторов спина, для использования коммутационных соотношений в процессе дальнейших вычислений. А именно

$$\begin{aligned}
(S_i^{\xi i}, S_i^{\eta i}, S_i^{\zeta i}) & \rightarrow (S_i^x, S_i^y, S_i^z) \\
(S_j^{\xi j}, S_j^{\eta j}, S_j^{\zeta j}) & \rightarrow (S_j^x, S_j^y, S_j^z) \tag{4.17}
\end{aligned}$$

То есть предполагаем, что  $S_i^x \equiv S_i^{x_i}$ .

Отметим, что слагаемые в гамильтониане  $H_M$

$$\frac{1}{2} \sin \theta_{i,j} (S_i^+ + S_i^-) S_j^z - \frac{1}{2} \sin \theta_{i,j} S_i^z (S_j^+ + S_j^-)$$

при суммировании по ближайшим соседям взаимно сокращаются при учете спинов на противоположных узлах кубической решетки, в отличие от суммирования слагаемых магнитоэлектрического взаимодействия

$$\begin{aligned}
& + \frac{J^{mf} P^z}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} [(S_i^+ + S_i^-)(S_j^+ + S_j^-) |\sin \theta_{i,j}| \\
& + 4S_i^z S_j^z |\sin \theta_{i,j}|].
\end{aligned}$$

которые не сокращаются при суммировании благодаря выбору векторов  $\vec{P}$  для противоположных узлов.

### § 3. Случай сверхрешетки с однослойной магнитной и сегнетоэлектрической пленкой

Как было показано в работе [34] в частном случае двумерной магнитной пленки отсутствует дальний магнитный порядок при ненулевых температурах для моделей систем изотропных спинов с взаимодействующими ближайшими соседями. Поэтому для стабилизации магнитного упорядочения при ненулевых  $T$  добавим анизотропное взаимодействие (см., Например, рис. 4.16а). Хорошо известно, что в двумерных или очень ферро – и антиферромагнитных тонких пленках подынтегральные выражения для вычисления  $\langle M \rangle$  в зависимости от температуры [см. уравнение (4.38)] расходятся как  $kdk/k^2$  (так как  $E \rightarrow k^2$  для ферромагнитной моды когда  $k \rightarrow 0$ ), тогда как в 3D или объемном магнетике подынтегральное выражение имеет зависимость  $k^2 dk/k^2$  при  $k \rightarrow 0$  и тем самым в этом случае нет особенности.

При моделировании методами Монте-Карло, статистическое усреднение выполнено с использованием стохастических случайных конфигураций, сгенерированных со статистической вероятностью, то есть отсутствовали моды  $k = 0$ . Таким образом, при моделировании методами Монте-Карло не сталкиваемся с такой математической особенностью, как при аналитических расчетах.

Поэтому, введем в гамильтониан следующий член для описания анизотропии между векторами спинов на узлах  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ , которая стабилизирует определенный выше угол между их локальными осями квантования  $S_i^z$  и  $S_j^z$ :

$$H_a = - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{i,j} S_i^z S_j^z \cos \theta_{i,j} \quad (4.20)$$

где параметр анизотропии  $K_{i,j}$  предполагаем положительным, и отличным от нуля только для ближайших взаимодействующих соседей. Кроме того, будем считать, что по величине параметр анизотропии много меньше, чем параметр

обменного взаимодействия  $J^m$ . Далее для простоты считаем, что  $K_{i,j} = K$  для пары ближайших соседей в плоскости  $xу$ .

Тогда полный гамильтониан магнитной пленки сверхрешетки запишем в виде

$$H_M = H_m + H_{mf} + H_a \quad (4.21)$$

Определим двухвременные температурные функции Грина

$$\begin{aligned} G_{i,j}(t, t') &= \langle\langle S_i^+(t); S_j^-(t') \rangle\rangle \\ &= -i\theta(t - t') \langle [S_i^+(t), S_j^-(t')] \rangle \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} F_{i,j}(t, t') &= \langle\langle S_i^-(t); S_j^-(t') \rangle\rangle \\ &= -i\theta(t - t') \langle [S_i^-(t), S_j^-(t')] \rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

Уравнения движений для этих функций выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dG_{i,j}(t, t')}{dt} &= \langle [S_i^+(t), S_j^-(t')] \rangle \delta(t - t') \\ &\quad - \langle\langle [H_M, S_i^+]; S_j^- \rangle\rangle \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dF_{i,j}(t, t')}{dt} &= \langle [S_i^-(t), S_j^-(t')] \rangle \delta(t - t') \\ &\quad - \langle\langle [H_M, S_i^-]; S_j^- \rangle\rangle \end{aligned} \quad (4.25)$$

Для слагаемых  $H_m$  и  $H_a$ , приведенные выше уравнения движения образуют цепочку уравнений движения с функциями Грина более высокого порядка, например, вида  $\langle\langle S_l^z S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle$  и  $\langle\langle S_l^\pm S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle$ . Эти функции Грина расцепить, аппроксимировать, согласно схеме расщепления Боголюбова – Тябликова:

$$\langle\langle S_l^z S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle \approx \langle S_l^z \rangle \langle\langle S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle \quad (4.26)$$

$$\langle\langle S_l^\pm S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle \approx \langle S_l^\pm \rangle \langle\langle S_i^\pm; S_j^- \rangle\rangle \approx 0 \quad (4.27)$$

Последнее расщепление приравниваем нулю в связи с тем, что поперечные спин-волновые движения  $\langle S_l^\pm \rangle$  со временем приравняются нулю.

Для слагаемого  $H_{mf}$  коммутационные соотношения  $[H_{mf}, S_i^\pm]$  приводят к слагаемому

$$D \sum_l \sin \theta [\mp S_l^z (S_l^+ + S_l^-) \pm 2S_l^\pm S_l^z] \quad (4.28)$$

И образуются функции Грина вида:

$$\langle\langle S_i^z S_l^\pm; S_j^- \rangle\rangle \approx \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_l^\pm; S_j^- \rangle\rangle \quad (4.29)$$

Отметим, что мы считаем угол  $\theta$  между ближайшими взаимодействующими спинами положительным. Приведенное выше уравнение, таким образом, связано с функциями  $G$  и  $F$  [см. (4.27)].

Воспользуемся преобразованиями Фурье в  $xu$  – плоскости для функций Грина  $G_{i,j}(t, t')$  и  $F_{i,j}(t, t')$  :

$$G_{i,j}(t, t', \omega) = \frac{1}{\Delta} \int_{BZ} d\vec{k}_{xy} e^{-i\omega(t-t')} g(\omega, \vec{k}_{xz}) e^{i\vec{k}_{xy} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (4.30)$$

$$F_{i,j}(t, t', \omega) = \frac{1}{\Delta} \int_{BZ} d\vec{k}_{xy} e^{-i\omega(t-t')} f(\omega, \vec{k}_{xz}) e^{i\vec{k}_{xy} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (4.31)$$

Здесь интегрирование выполняется в первой  $xu$  зоне Бриллюэна по поверхности, площадью  $\Delta$ ,  $\omega$  - частота элементарных возбуждений.

Определим энергию спиновых волн как  $E = \hbar\omega$ .

Для магнитного монослоя получим, после Фурье – преобразования систему уравнений

$$\begin{aligned} (E + A)g + Bf &= 2\langle S^z \rangle \\ -Bg + (E - A)f &= 0 \end{aligned} \quad (4.32)$$

Здесь мы используем следующие обозначения

$$A = -J^m [8\langle S^z \rangle \cos \theta (1 + d) - 4\langle S^z \rangle \gamma (\cos \theta + 1)] - 4J^{mf} P^z \sin \theta \langle S^z \rangle \gamma + 8J^{mf} P^z \sin \theta \langle S^z \rangle \quad (4.33)$$

$$B = 4J^m \langle S^z \rangle \gamma (\cos \theta - 1) - 4J^{mf} P^z \sin \theta \langle S^z \rangle \gamma \quad (4.34)$$

Анизотропия нормирована как  $d = K/J^m$ ,  $\gamma = (\cos k_x a + \sin k_y a)/2$ ,  $k_x$  и  $k_y$  – это компоненты волнового вектора в  $xu$  плоскости,  $a$  – постоянная решетки.

Энергии спиновых волн определяются секулярными уравнениями

$$\begin{aligned}(E + A)(E - A) + B^2 &= 0 \\ E^2 - A^2 + B^2 &= 0 \\ E &= \pm\sqrt{(A + B)(A - B)}\end{aligned}\tag{4.35}$$

В уравнении (4.35)  $\pm$  обозначает левые и правые спиновые прецессии.

Отметим, что

(i) Если  $\theta = 0$ , то  $B = 0$ , также равны нулю  $4J^{mf}P^z \sin\theta \langle S^z \rangle \gamma$  и  $8J^{mf}P^z \sin\theta \langle S^z \rangle$ , и мы получим дисперсионное уравнение для ферромагнитной пленки

$$E = 2ZJ^m \langle S^z \rangle (1 - \gamma)\tag{4.36}$$

где  $Z = 4$  – это координационное число для простой кубической решетки,  $d = 0$ .

(ii) Если  $\theta = \pi$ , то имеем

$$A = -8J^m \langle S^z \rangle, B = -8J^m \langle S^z \rangle \gamma$$

получим дисперсионное уравнение для антиферромагнитной пленки

$$E = 2ZJ^m \langle S^z \rangle \sqrt{1 - \gamma^2}\tag{4.37}$$

iii) Рассматривая влияние магнитоэлектрического взаимодействия, имеем в виду, что в этом случае

$$0 < \cos\theta < 1 \quad (0 < \theta < \pi/2).$$

Если  $d = 0$  подкоренное выражение в формуле (4.35) всегда положительно для любых  $\theta$ . Оно равно нулю только при  $\gamma = 1$ . В случае воздействия магнитоэлектрической связи нет необходимости в учете анизотропии  $d$  для стабилизации спектра спиновых волн при нуле температуре. Если  $d \neq 0$ , то мы наблюдаем скачок при  $\gamma = 1$ .

На рисунке 4.16 приведены зависимости энергии спиновых волн от волнового вектора для различных значений магнитоэлектрического взаимодействия:  $\theta = 0.3$  радиан ( $\cong 17.2^\circ$ ) и  $\theta = 1$  радиан ( $\cong 57.30^\circ$ ). Спектр спиновых волн симметричен для положительных и отрицательных значений волновых векторов, а также для левостороннего и правостороннего направления прецессий. Отметим, что для малых значений углов  $\theta$  (а значит и малых значений

параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$ ) график зависимости энергии от волнового вектора имеет параболический характер при малых волновых векторах  $k$  (Рис. 4.16 (a)) аналогично случаю ферромагнетика. И напротив, при больших величинах магнитоэлектрической связи график зависимости энергии от волнового вектора имеет линейный характер и линейно зависит от  $k$  (Рис. 4.16 (b)). Такое поведение спектра характерно для антиферромагнитного случая [28].

Изменение поведения прогрессирует с увеличением  $\theta$ , никакого внезапного перехода от ферромагнитной закономерности ( $k^2$ ) к антиферромагнитной ( $k$ ) не наблюдается.

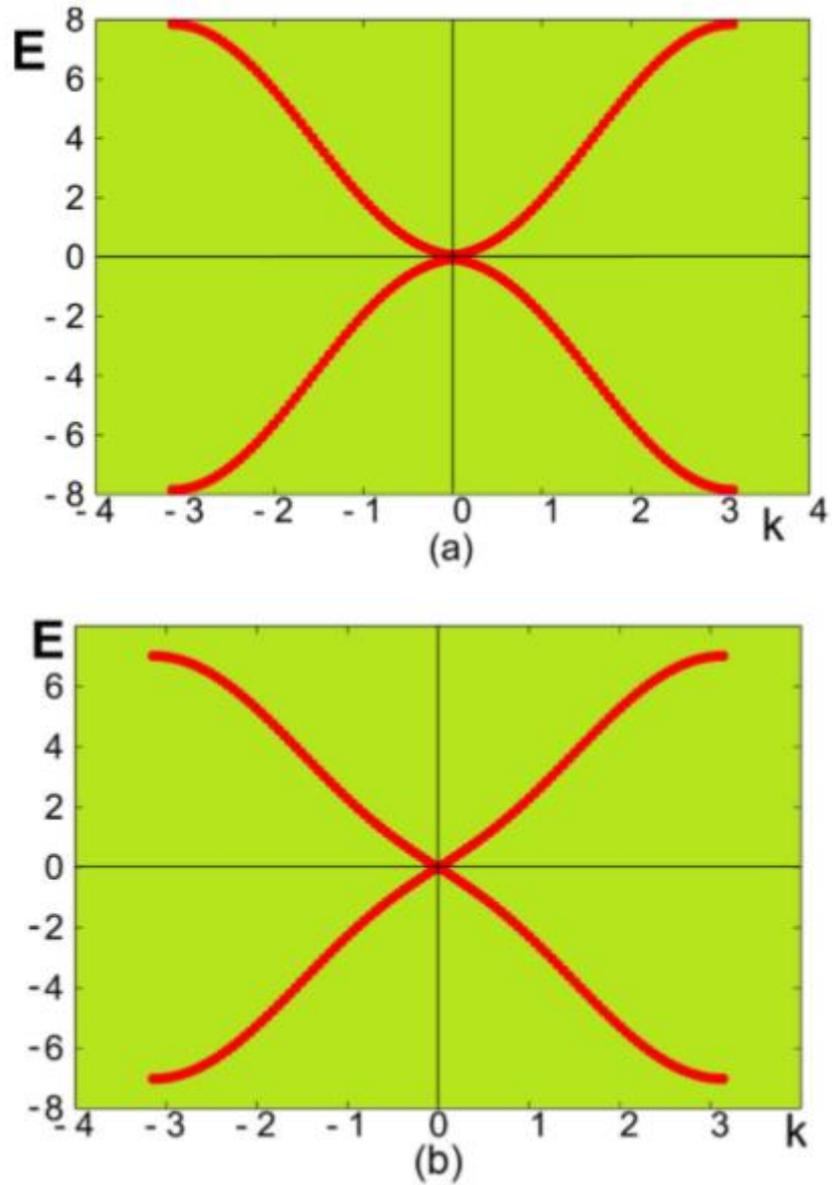


Рис. 4.16. Энергетический спектр спиновых волн  $E(k)$  в зависимости от волнового вектора  $k$  ( $k \equiv k_x = k_z$ ) для (a)  $\theta = 0.3$  радиан и (b)  $\theta = 1$  радиан в двумерном случае при  $T = 0$ .

В случае  $S = 1/2$  намагниченность определяется как

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{\Delta} \iint dk_x dk_y \left[ \frac{1}{e^{\frac{E_i}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{e^{-\frac{E_i}{k_B T}} - 1} \right] \quad (4.38)$$

где для каждого  $\vec{k}$  получается  $\pm E_i$  величин. Поскольку  $E_i$  зависит от  $S^z$ , намагниченность может быть вычислена при ненулевых температурах самосогласованным образом используя формулу (4.38).

Следует также обратить внимание на тот факт, что анизотропия  $d$  позволяет избежать логарифмической расходимости при  $k = 0$ , так что мы можем наблюдать дальний порядок при ненулевых  $T$  в двумерной (однослойной магнитной пленке). На рис. 4.17 приведена температурная зависимость намагниченности  $M (\equiv \langle S^z \rangle)$ , рассчитанная по формуле (4.38) для значения  $d = 0.001$ .

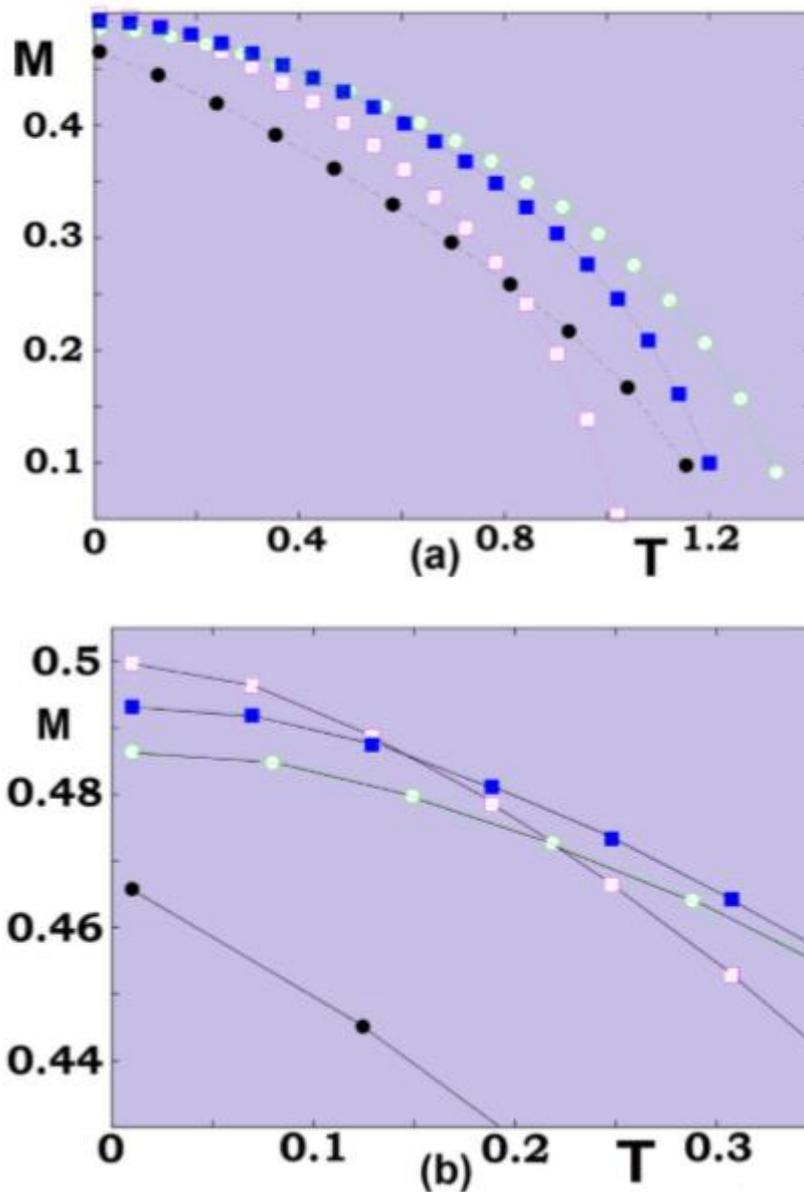


Рис. 4.17. (а) Намагниченность  $M = \langle S^z \rangle$  в зависимости от  $T$ , для двумерной магнитной пленки.  $\theta = 0.175$  радиан (фиолетовые неокрашенные квадраты),  $\theta = 0.524$  (синие окрашенные квадраты),  $\theta = 0.698$  (зеленые неокрашенные окружности),  $\theta = 1.047$  (черные окрашенные окружности). (б) Увеличение в области низкотемпературных значений, для подтверждения кроссовера намагниченности.

Намагниченность  $M$  сильно зависит от температур: при высоких  $T$  чем больше угол  $\theta$  тем больше  $M$ . Однако при  $T = 0$  спиновая длина становится

меньше для больших величин магнитоэлектрического взаимодействия (то есть величин  $\theta$ ) из-за так называемого спинового сокращения, которое имеет место в антиферромагнетиках [28]. Как следствие, происходит кроссовер (пересечение) кривых намагниченности для различных значений  $\theta$  при низкой  $T$ , как показано на рис. 4.17 (b).

Зависимость значений намагниченности от величины  $\theta$  (параметра магнитоэлектрического взаимодействия) приведены на рис. 4.18.

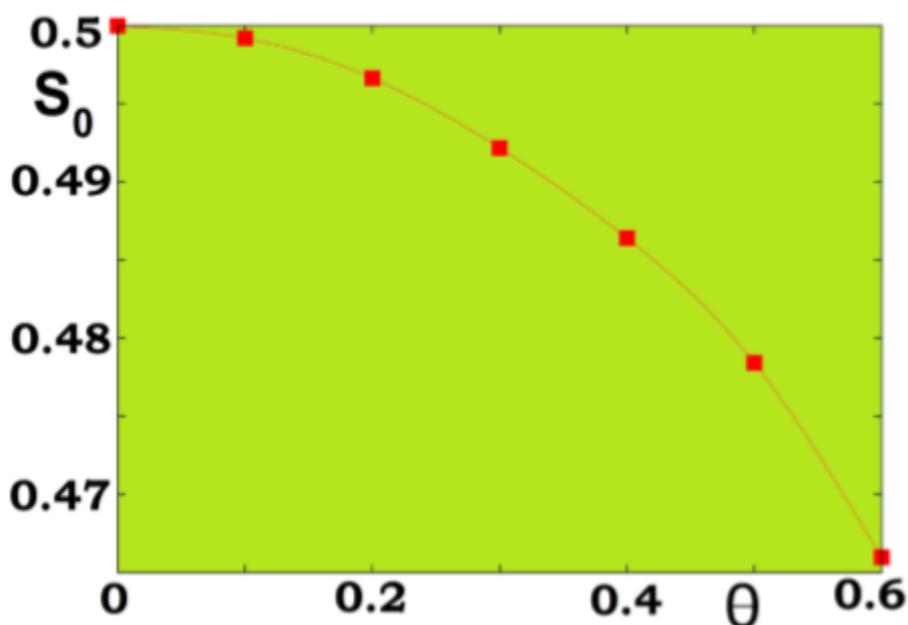


Рис. 4.18. Значения намагниченности в зависимости от величины  $\theta$  (параметра магнитоэлектрического взаимодействия) для сверхрешетки, состоящей однослойной магнитной и сегнетоэлектрической пленки.

#### § 4. Сверхрешетка из двуслойной магнитной и сегнетоэлектрической пленки

Найдем аналитические выражения для намагниченности и энергии спиновых волн в случае сверхрешетки, образованной из магнитной пленки, толщиной в два атомарных слоя, находящейся между сегнетоэлектрическими пленками. Из симметричных соображений можно заключить, что спины, находящиеся друг на соседних слоях параллельны друг другу.

Энергию спина в этом случае можно записать в виде:

$$E_i = -4J^m S^2 \cos \theta - J^m S^2 + 4J^{mf} P^z S^2 \sin \theta \quad (4.39)$$

здесь учтены энергия обменного взаимодействия спина с четырьмя ближайшими соседями в  $xу$  –плоскости, межплоскостное обменное взаимодействие между спинами на разных магнитных слоях. А интерфейсная связь в данном случае учтена только с одним вектором дипольного момента вместо (см. формулу (4.12)).

Минимизацией энергетического функционала получаем для двуслойной магнитной пленки

$$\tan \theta = \frac{-J^{mf}}{J^m}$$

Записывая уравнение движений для функций Грина (4.22) - (4.23) для каждого слоя магнитной пленки и выполнив затем преобразование Фурье в  $xу$  – плоскостях получим систему зацепляющихся уравнений.

Для рассматриваемой сверхрешетки, энергия спиновых волн определяется собственными значениями матричного уравнения

$$\mathbf{M}(E)\mathbf{h} = \mathbf{u} \quad (4.40)$$

где

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} g_{1,n'} \\ f_{1,n'} \\ g_{2,n'} \\ f_{2,n'} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 2\langle S_1^z \rangle \delta_{1,n'} \\ 0 \\ 2\langle S_2^z \rangle \delta_{2,n'} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

здесь принято, что  $E = \hbar\omega$ . Элементы матрицы  $\mathbf{M}(E)$

$$\begin{pmatrix} E + A_1 & B_1 & C_1 & 0 \\ -B_1 & E - A_1 & 0 & -C_1 \\ C_2 & 0 & E + A_2 & B_2 \\ 0 & -C_2 & -B_2 & E - A_2 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

Коэффициенты

$$A_1 = -J^m [8\langle S_1^z \rangle \cos \theta (1 + d) - 4\langle S_1^z \rangle \gamma (\cos \theta + 1)] - \\ - 2J^m \langle S_2^z \rangle - 4D \sin \theta \langle S_1^z \rangle \gamma + 8D \sin \theta \langle S_1^z \rangle$$

$$A_2 = -J^m [8\langle S_2^z \rangle \cos \theta (1 + d) - 4\langle S_2^z \rangle \gamma (\cos \theta + 1)] \\ - 2J^m \langle S_1^z \rangle - 4D \sin \theta \langle S_2^z \rangle \gamma + 8D \sin \theta \langle S_2^z \rangle \quad (4.44)$$

$$B_n = 4J^m \langle S_n^z \rangle \gamma (\cos \theta - 1) - 4D \sin \theta \langle S_n^z \rangle \gamma, \quad n = 1, 2 \\ - 2J^m \langle S_1^z \rangle - 4D \sin \theta \langle S_2^z \rangle \gamma + 8D \sin \theta \quad (4.45)$$

$$C_n = 2J^m \langle S_n^z \rangle, \quad n = 1, 2 \quad (4.46)$$

Из симметричных соображений  $\langle S_1^z \rangle = \langle S_2^z \rangle$ .

На рис. 4.19 показана зависимость энергии спиновых волн в зависимости от волнового вектора для двухслойной магнитной пленки при относительно большой величине магнитоэлектрической связи на границе, то есть при  $\theta = 0.6$ .

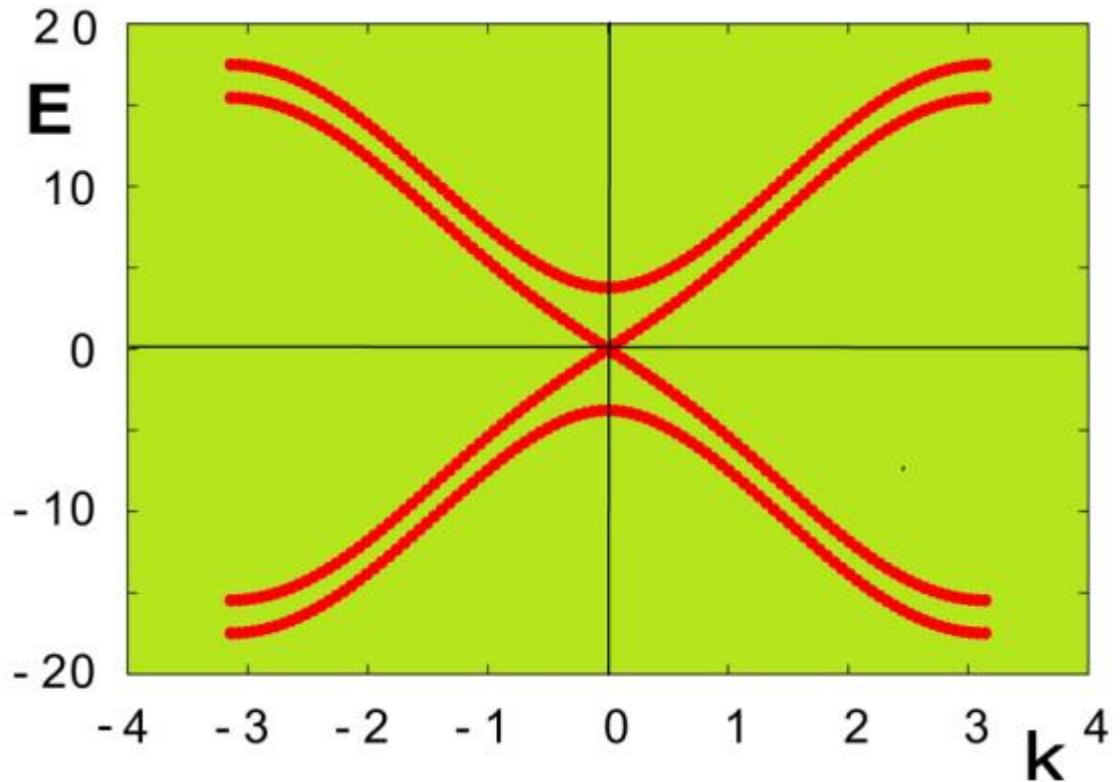


Рис. 4.19. Энергия спиновых волн в зависимости от волнового вектора  $k$  ( $k \equiv k_x = k_z$ ) при  $T = 0$  для двухслойной магнитной пленки в магнитоэлектрической сверхрешетке при  $\theta = 0.6$  радиан.

Из Рис. 4.19 отметим два важных момента

(i) первая мода проявляет антиферромагнитное поведение  $E \propto k$  в длинноволновом пределе для больших значений  $\theta = 0.6$ , а следовательно для большой межфазной магнитоэлектрической связи.

(ii) Вторая мода спин-волнового спектра, расположенная над первой модой имеет параболический вид, то есть  $E \propto k^2$ , это ферромагнитная спиновая волна, возбуждаемая параллельно расположенными межплоскостными ближайшими соседями, выстроенными в направлении оси  $z$ .

В заключении этой главы подчеркнем, что магнитоэлектрическое взаимодействие между ферромагнитной и сегнетоэлектрической пленками в сверхрешетке определяет вид спектра спиновых волн при  $k \rightarrow 0$ . Квантовые

флуктуации, конкурируя с температурными эффектами вызывают кросс-овер намагниченностей при различных значениях величины магнитоэлектрического взаимодействия: в общем случае, более сильное магнитоэлектрическое взаимодействие приводит к более сильному сжатию спинов к плоскости при  $T = 0$ , в результате соответствующая величина намагниченности принимает меньшие значения. Однако при повышении температуры более сильное магнитоэлектрическое взаимодействие приводит к более сильной намагниченности. Это объясняет кроссовер при умеренной температуре.

## § 5. Выводы к главе

Рассмотрена новая модель магнитоэлектрической связи между магнитной пленкой и сегнетоэлектрической пленкой в сверхрешетке. Эта связь имеет вид кирального магнитоэлектрического взаимодействия между дипольным моментом сегнетоэлектрической пленки и спинами в плоскости магнитной пленки на границе раздела сверхрешетки мультиферроика. Получены аналитические выражения для энергии элементарных возбуждений спиновых волн в двумерной и трехмерной магнитной пленке в отсутствии внешнего магнитного поля методом функции Грина. Обнаружено сильное влияние магнитоэлектрической связи на спектр спиновых волн, а также на намагниченность при низких температурах.

# **Глава 5. Скирмионные кристаллы и фазовые переходы в фрустрированной сверхрешетке ферромагнетик / сегнетоэлектрик. Киральное магнитоэлектрическое взаимодействие в фрустрированной $J_1 - J_2$ модели**

## **§ 1. Введение**

Описание и построение корректных моделей процессов формирования и устойчивости скирмионов является очень актуальной задачей с точки зрения практических приложений. Поэтому, попытки построить модели взаимодействия скирмионов на интерфейсах различных сред между различными связанными интерфейсами, предпринимаются у разных исследовательских групп.

В данной главе рассматривается сверхрешетка, образованная из чередующихся «фрустрированных» магнитных пленок и «фрустрированных» сегнетоэлектрических пленок. Фрустрации, возникающие из-за конкурирующих взаимодействий между различными спиновыми парами были исследованы в течение последних четырех десятилетий. Можно сослаться на обзор [131], в котором рассмотрены и проанализированы различные варианты моделей фрустрированных систем и результаты экспериментов по микромагнитной структуре. Основная цель данной главы состоит в том, чтобы исследовать влияние фрустрации при наличии магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела двух подсистем. Оказывается, что фрустрация приводит к усилению скирмионной структуры, возникающей в результате конкуренции неколлинеарного магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля, приложенного перпендикулярно к плоскости пленок. Для построения фазовых диаграмм и исследования фазовых переходов из скирмионной фазы

в сверхрешетке в зависимости от величины фрустрации используется численный метод Монте-Карло, который с успехом применяется для исследования фазовых переходов и критических явлений в магнетиках. При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации, выполненные автором лично или в соавторстве, в которых согласно положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [131, 156, 221, 222]. Авторский вклад заключался в участии в постановке задач, выполнении исследования, написании программ для моделирования фазовых переходов и критических явлений, отладке программ для расчетов на суперкомпьютере, обсуждении результатов и подготовке статей в перечисленных публикациях.

## § 2. Гамильтониан фрустрированной $J_1 - J_2$ модели.

### Скирмионный кристалл

Рассмотрим сверхрешетку, состоящую из чередующихся магнитных и сегнетоэлектрических пленок (см. Рис. 1а). Для простоты будем предполагать, что обе подсистемы имеют структуру простой кубической решетки с одинаковой постоянной решетки.

Гамильтониан рассматриваемой сверхрешетки мультиферроика определим следующим образом

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (5.1)$$

где  $H_m$  и  $H_f$  это гамильтонианы магнитной и сегнетоэлектрической подсистем, соответственно.  $H_{mf}$  - гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия между двумя граничащими магнитной и сегнетоэлектрической пленками. Так как мы рассматриваем фрустрированные подсистемы, опишем гамильтониан магнитной пленки спиновой моделью Гейзенберга на простой кубической решетке следующим образом:

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i,k} J_{ik}^{2m} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k - \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i \quad (5.2)$$

здесь принято, что  $\mathbf{S}_i$  – это спин  $i$  – го узла простой кубической решетки,  $\mathbf{H}$  – напряженность внешнего магнитного поля,  $J_{ij}^m$  – величина магнитного обменного взаимодействия между парой спинов на узле  $i$  и  $j$ . Ввиду наличия фрустрации учтем как взаимодействие ближайших соседей (NN), обозначенное  $J^m$ , так и взаимодействие соседей, следующих за ближайшими (NNN), обозначенное  $J^{2m}$ . Будем считать, что  $J^m > 0$  и одинаково для всех ближайших спинов в магнитной пленке, как в плоскости, так и для пары спинов между плоскостями. Для того, чтобы ввести в рассмотрение фрустрации, предположим  $J^{2m} < 0$ , а именно взаимодействие между соседями следующими за ближайшими антиферромагнитно и одинаково для спиновых пар в магнитной пленке, как в плоскости, так и между плоскостями. Внешнее магнитное поле  $\mathbf{H}$  направим вдоль оси  $z$ , которая перпендикулярна плоскости слоев сверхрешетки. Взаимодействие спинов на границе раздела между магнитной и ферроэлектрической пленкой будет введено ниже.

Следует отметить, что  $J_1 - J_2$  модель на простой кубической решетке изучалась для спинов Гейзенберга в работе [156] и для спинов Изинга в работе [158], но в указанных работах рассматривались только объемные магнитные кристаллы, а не сверхрешетки, обладающие двумя параметрами порядка. Кроме того, оба параметра  $J_1$  и  $J_2$  были антиферромагнитны ( $J_1 < 0, J_2 < 0$ ). В указанных работах было вычислено критическое значение  $|J_2^c| = 0.25J_1$ , выше которого антиферромагнитное упорядочение переходит в фрустрированную решетку, где образуется линия со спинами направленными вверх, а соседние линии со спинами направленными вниз. Для случая когда  $J_1 > 0$  – (ферромагнитный порядок для ближайших спиновых пар),  $J_2 < 0$  (антиферромагнитный порядок для следующих за ближайшими соседями спиновых пар)

- легко показать, что критическое значение  $J_C^{2m} = -0.5J^m$ . При этом ферромагнитное упорядочение переходит в антиферромагнитное.

Для сегнетоэлектрической пленки для простоты будем считать, что электрические поляризации являются изингоподобными векторами, модуль которых равен единице, и может быть направлен только либо в направлении оси  $z$ , либо в противоположном. Гамильтониан сегнетоэлектрической подсистемы запишем в виде

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij}^f P_i \cdot P_j - \sum_{i,k} J_{ik}^{2f} P_i \cdot P_k \quad (5.3)$$

где  $P_i$  – это поляризация  $i$  – го узла простой кубической решетки,  $J_{ij}^f$  – величина обменного взаимодействия между поляризациями на узлах  $i$  и  $j$ . Как и при описании магнитной пленки, введем предположение, что  $J_{ij}^f = J^f > 0$  одинаково для всех ближайших узлов (NN) в сегнетоэлектрической пленке, и  $J_{ij}^{2f} = J^{2f} < 0$  для соседей, следующих за ближайшими (NNN).

Как известно, взаимодействие Дзялошинского-Мории имеет вид:

$$H_{DM} = \mathbf{D}_{i,j} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] \quad (5.4)$$

где  $\mathbf{S}_i$  – спин  $i$  – го магнитного иона и  $\mathbf{D}_{i,j}$  – вектор Дзялошинского-Мории. Вектор  $\mathbf{D}_{i,j}$  пропорционален векторному произведению  $[\mathbf{R} \times \mathbf{r}_{i,j}]$  вектора  $\mathbf{R}$ , который обозначает смещение лиганда (например атома кислорода) и единичного вектора  $\mathbf{r}_{i,j}$ , направленного вдоль оси, соединяющей магнитные ионы на узлах  $i$  и  $j$  (см. рис. 5.1б). Запишем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{i,j} &= [\mathbf{R} \times \mathbf{r}_{i,j}] \\ \mathbf{D}_{j,i} &= [\mathbf{R} \times \mathbf{r}_{j,i}] = -\mathbf{D}_{i,j} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Предположим, что

$$\mathbf{D}_{i,j} = D e_{i,j} \mathbf{z} \quad (5.6)$$

где  $D$  – это некоторая постоянная,  $\mathbf{z}$  – единичный вектор, направленный вдоль оси  $z$ , и  $e_{i,j} = -e_{j,i} = 1$ .

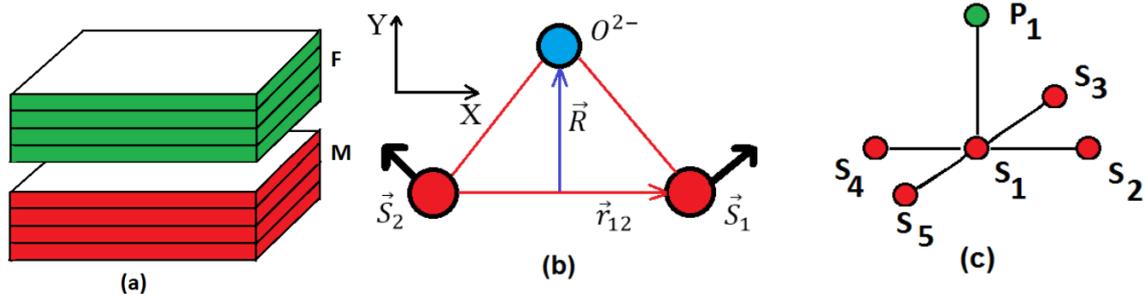


Рис. 5.1. (а) Сверхрешетка ферромагнетик/сегнетоэлектрик, (б) Позиции спинов на плоскости  $xu$  и расположение немагнитного иона кислорода, определяющие вектор Дзялошинского –Мории. (с) Межплоскостное взаимодействие между поляризацией  $P$  в нижнем сегнетоэлектрическом слое и 5 спинами в верхнем магнитном слое в магнитоэлектрическом взаимодействии Дзялошинского-Мории.

Для магнитоэлектрического взаимодействия между граничащими сегнетоэлектрическим и магнитным слоями (интерфейс) сверхрешетки гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия определим следующим образом

$$H_{mf} = \sum_{i,j,k} J_{i,j}^{mf} e_{i,j} \mathbf{P}_k \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] \quad (5.7)$$

Здесь принято, что  $\mathbf{P}_k$  – это поляризация на  $k$  – м узле ферроэлектрического поверхностного слоя, а  $\mathbf{S}_i$  и  $\mathbf{S}_j$  принадлежит интерфейсному (поверхностному) магнитному слою (см. Рис. 5.1с). В этом выражении множитель  $J_{i,j}^{mf} e_{i,j} \mathbf{P}_k$  играет роль вектора Дзялошинского – Мории, который определяется формулой

(5.6) и направлен перпендикулярно плоскости пленки, то есть перпендикулярно плоскости  $xu$ . Когда производится суммирование по ближайшим соседним парам, нужно обратить внимание на соответствие знаков перед  $e_{i,j}$  и векторным произведением  $[\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]$  [173].

В дальнейшем, примем, что  $J_{i,j}^{mf} = J^{mf}$  и не зависит от индексов суммирования  $(i, j)$ .

Поскольку вектор поляризации  $\mathbf{P}_k$  направлен параллельно оси  $z$ , в отсутствии внешнего магнитного поля спины во всех слоях магнитной пленки будут расположены в плоскости  $xu$  для того, чтобы минимизировать энергию поверхностного магнитоэлектрического взаимодействия согласно выражению (5.7). Магнитоэлектрическое взаимодействие  $J^{mf}$  благоприятствует образованию неколлинеарной спиновой структуры, конкурирующей с обменными взаимодействиями  $J^m$  и  $J^{2m}$ , которые стремятся выстроить коллинеарную (ферро – или антиферромагнитную) спиновую конфигурацию. В ферроэлектрических слоях реализуется только коллинеарное (ферро- или антиферроэлектрическое) упорядочение, в силу сделанного предположения об изинговской природе векторов поляризации. Как показывают экспериментальные данные, величина параметра магнитоэлектрического взаимодействия много меньше, чем параметры обменных взаимодействий в гамильтониане. Однако, в нанопленках и сверхрешетках магнитоэлектрическое взаимодействие имеет решающее значение для установления неколлинеарного магнитного дальнего порядка. Было показано, что спин-орбитальное взаимодействие Рашбы приводит к сильному взаимодействию Дзялошинского- Мории на интерфейсе [74, 75], где нарушение симметрии по отношению к инверсии на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрической пленок приводит к тому, что может меняться магнитные состояния. Было установлено, что взаимодействие Дзялошинского – Мории играет ключевую роль в образовании, и стабилизации скирмионов. хиральных доменных стенок.

Из выражения (5.7) можно сделать вывод о том, что если вектора поляризации направлены вдоль оси  $z$ , то при отсутствии обменных слагаемых, магнитоэлектрическое взаимодействие на интерфейсе примет минимально возможное значение, если вектора  $\mathbf{S}_i$  и  $\mathbf{S}_j$  будут лежать в  $xu$  плоскости на интерфейсе и будут направлены перпендикулярно друг другу. Когда включаются обменные слагаемые, они будут конкурировать с поверхностным (интерфейсным) магнитоэлектрическим взаимодействием. Как будет показано ниже, результатом такой конкуренции является неколлинеарная спиновая конфигурация.

Следует отметить, что в случае рассматриваемой фрустрированной пленки, состоящей из нескольких слоев, углы между ближайшими парами спинов в каждом магнитном слое принимают отличные значения в различных атомарных слоях. В рассматриваемом случае, вычисление значений этих углов аналитически весьма затруднительно. Поэтому для решения задачи нахождения конфигурации основного состояния магнитной и ферроэлектрической пленок модифицирован численный метод минимизации энергетического функционала - метод наискорейшего спуска.

Основная идея используемого метода состоит в поиске минимума энергии каждого спина и поляризации на соответствующих узлах. Для этого определяется направление локального поля, действующего на спин со стороны ближайших соседних спинов и соседей, следующих за ближайшими. Спин на рассматриваемом узле направляем параллельно локальному полю. Чтобы выполнить такой шаг, сначала генерируется случайным образом начальная спиновая конфигурация по всем узлам узлам сверхрешетки. Далее мы выбираем какую либо стартовую точку со спином или поляризацией и вычисляем локальное поле, включающее все взаимодействия действующие на данный узел. Выравниваем спин согласно направлению вычисленного локального поля, затем переходим к другому узлу и повторяем эту процедуру до тех пор, пока не рассмотрим все узлы сверхрешетки. Затем указанная процедура повторяется до тех пор пока полная энергия не достигнет

минимального значения. Расчеты проводятся для образца с латеральными размерами  $N \times N \times L$ . На плоскость  $xy$  сверхрешетки накладываются периодические граничные условия, и плоскость  $xy$  имеет размеры  $N \times N$ , где  $N=60$ . Расчеты проведены для сверхрешетки, содержащей  $L_m = L_f = 4$  атомарных слоя, где  $L_m[L_f]$  – это количество магнитных (сегнетоэлектрических) слоев.

Для простоты, в численных расчетах при моделировании предположим, что обменные параметры между ближайшими парами соседних спинов и поляризации равны единице ( $J^m = J^f = 1$ ). Исследуем влияние параметров взаимодействий  $(J^{2m}, J^{2f})$  и  $J^{mf}$  на структуру основного состояния поверхностного магнитного слоя и внутренних слоев. Следует отметить, что используемый метод наискорейшего спуска вычисляет реальное основное состояние при значениях параметра магнитоэлектрического взаимодействия, в интервале  $J^{mf} \in (-1.25, 0)$ . При  $J^{mf} < -1.25$  магнитоэлектрическое взаимодействие становится доминирующим и угол между парами соседних спинов стремится к  $\pi/2$ . В результате слагаемые в гамильтониане Гейзенберга для магнитной пленки, содержащие скалярные произведения векторов ближайших спиновых пар стремятся к нулю, и минимальное значение полной энергии магнитной пленки соответствует энергии магнитоэлектрического взаимодействия.

Рассмотрим случай фрустрированного режима с  $(J^{2m}, J^{2f}) \in (-0.4, 0)$ , а именно в интервале NNN-взаимодействий до критического значения  $J^{2m} = J^{2f} = -0.5$ , как указано выше в случае  $(J^{2m}, J^{2f}) \geq 0.5$  происходит переход к антиферромагнитному упорядочению.

На рисунке 5.2 показана спиновая конфигурация основного состояния на поверхностном магнитном слое, граничащим с одной стороны с магнитным слоем, а с другой с ферроэлектрическим слоем в отсутствии внешнего магнитного поля. Как можно видеть, спиновая конфигурация имеет полосовую фазу с длинными островками и доменными стенками. Внутренние магнитные слои имеют такую же структуру.

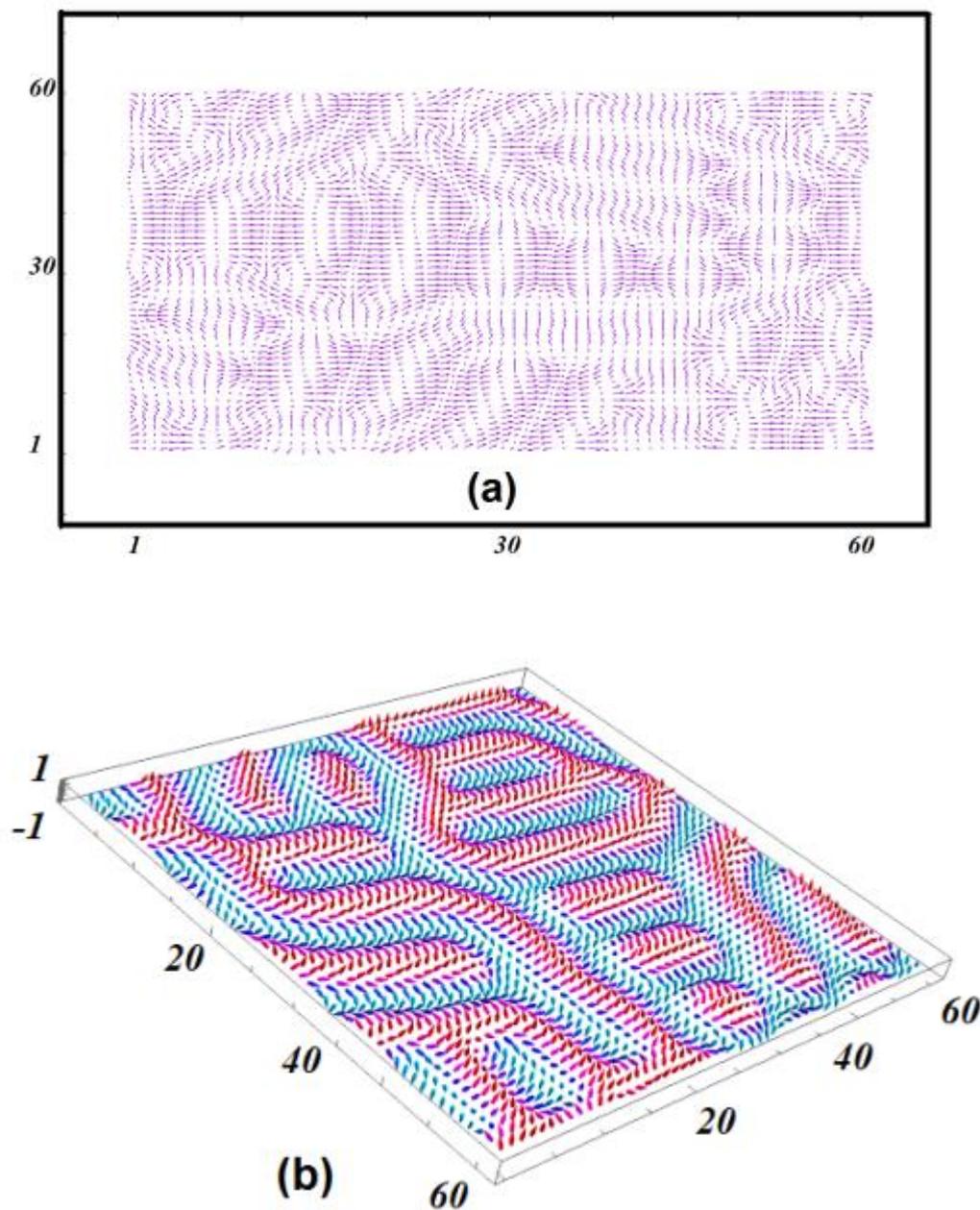


Рис.5.2. (а) Спиновая конфигурация основного состояния (2D) на поверхностном магнитном слое, граничащим с одной стороны с магнитным слоем, а с другой с ферроэлектрическим слоем (интерфейс) при  $H = 0$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{2m} = J^{2f} = -0.3$ ,  $J^{mf} = -1.25$ , (б) трехмерная визуализация

При включении постоянного внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси  $z$ , перпендикулярно плоскости сверхрешетки, на интерфейсном и внутреннем магнитном слое образуются скирмионы. На рис. 5.3. показана спиновая конфигурация основного состояния на интерфейсе и внутреннем магнитном слое при следующих значениях параметров  $J^{mf} = -1.25$ ,  $J^{2m} =$

$J^{2f} = -0.2$  и напряженности внешнего магнитного поля  $H = 0.25$ . Выделенный скирмион показан на рисунке 5.4а. Из графика проекций на ось  $z$  компонент спиновых векторов вдоль скирмиона, изображенных на рисунке 5.4b, следует, что наблюдаемые скирмионы являются скирмионами блоховского типа.

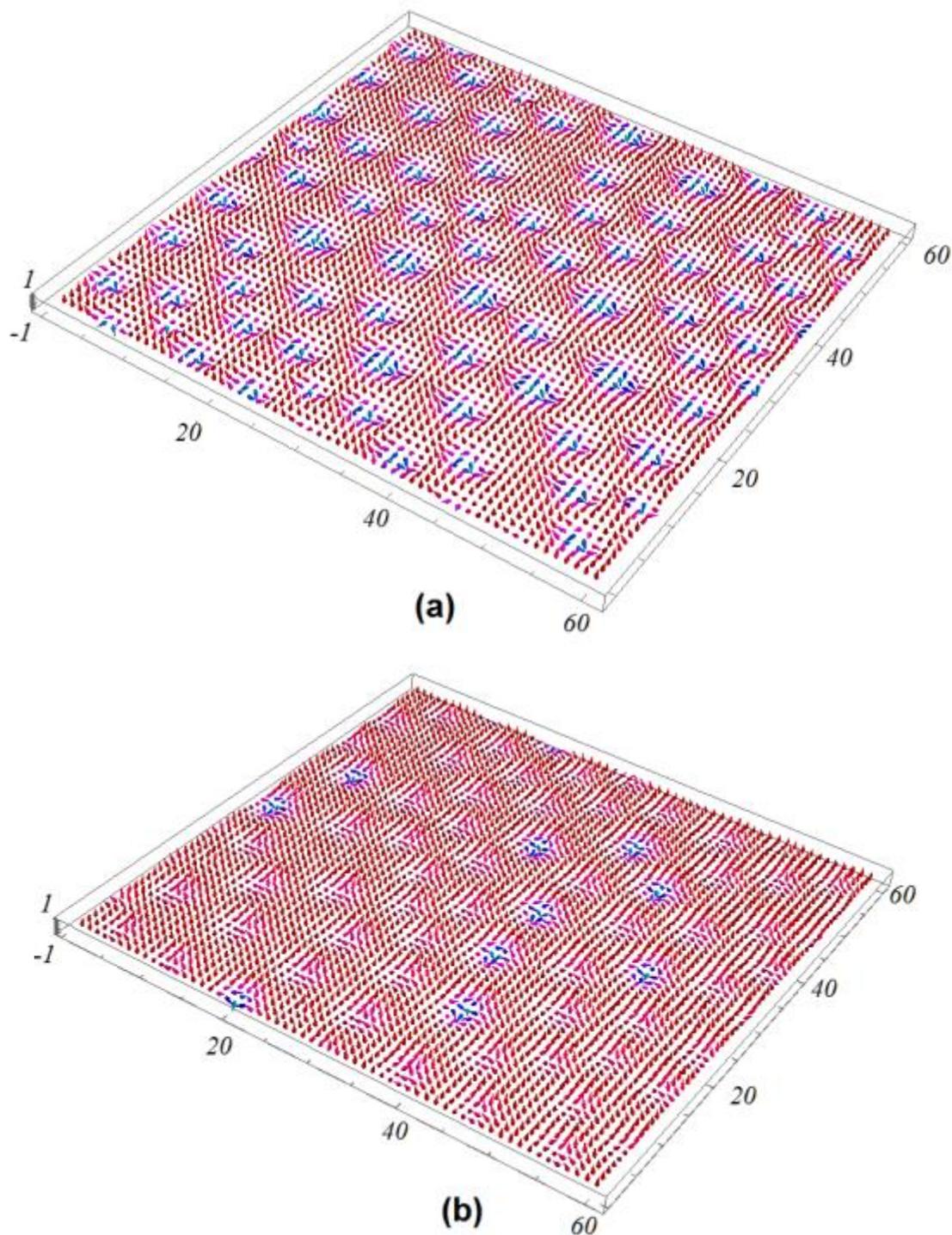
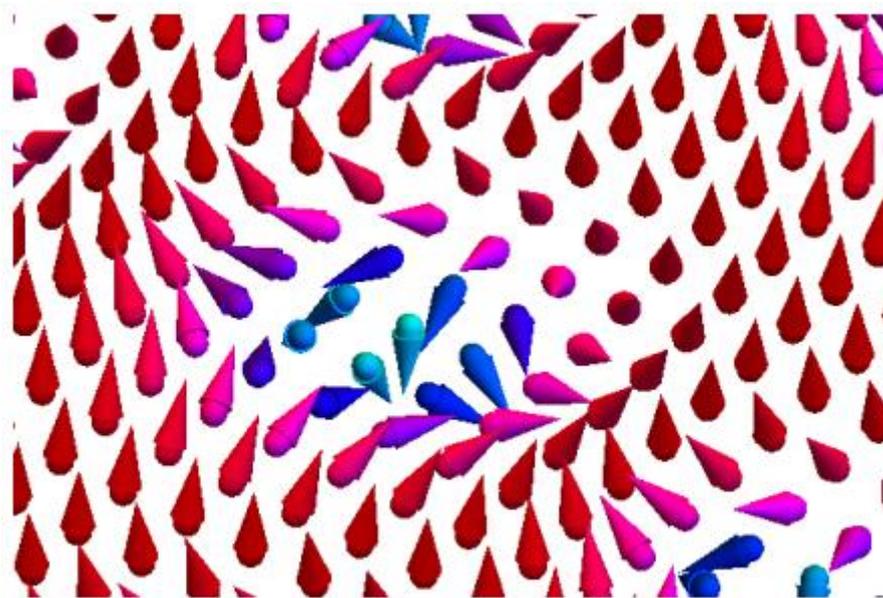
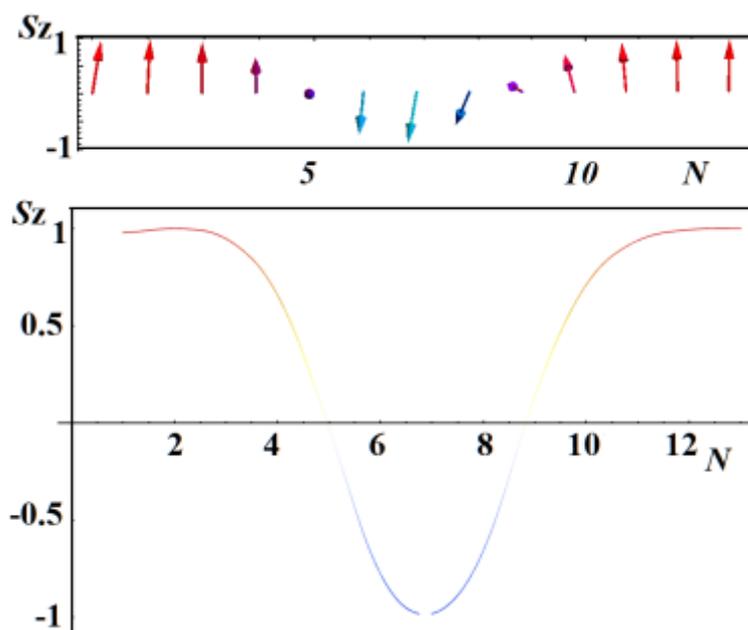


Рис. 5.3. (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки для умеренной фрустрированной сверхрешетки  $J^{2m} = J^{2f} = -0.2, J^m = J^f = 1, J^{mf} = -1.25, H = 0.25$

(b) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на внутреннем слое магнитной пленки.



(a)

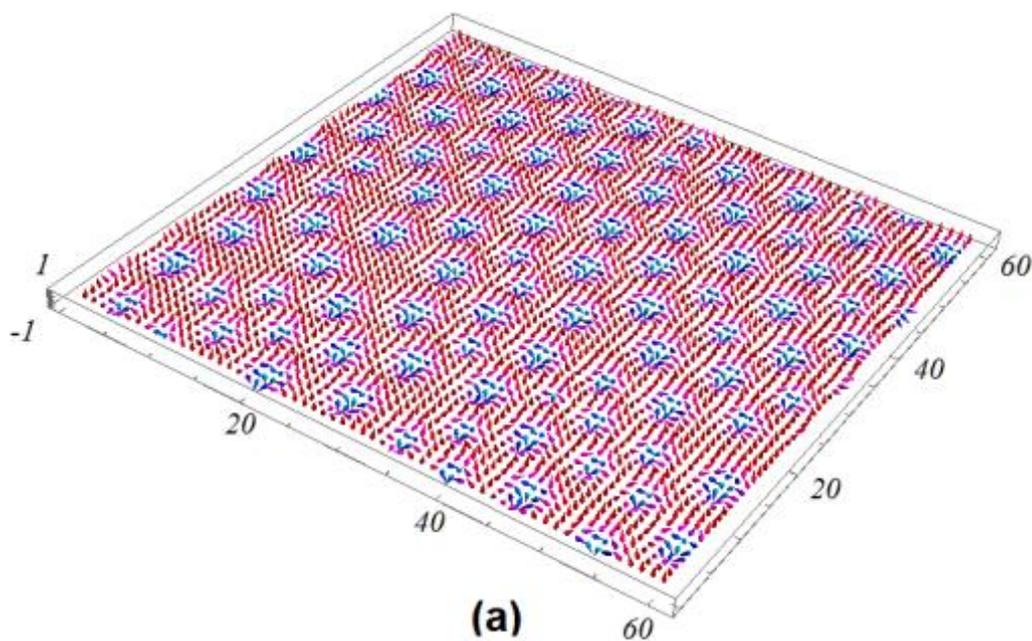


(b)

Рис. 5.4. (a) Выделенный и увеличенный скирмион с интерфейсного слоя при  $J^{2m} = J^{2f} = -0.2$ . Спины красного цвета направлены вверх, 4 спина синего цвета направлены вниз, другие цветовые оттенки соответствуют спиновой ориентации между этими двумя состояниями. Скирмион блоховского типа.

(b) z- компоненты векторов спинов на узлах, вдоль скирмиона.  $J^{2m} = J^{2f} = -0.2, J^m = J^f = 1, J^{mf} = -1.25, H = 0.25$

При напряженности внешнего магнитного поля  $H = 0.25$ , если увеличить параметры обменного взаимодействия между следующими за ближайшими соседними узлами (NNN), то есть тем самым усилив фрустрацию сверхрешетки, увеличивается количество скирмионов как на интерфейсном слое, так и на внутренних слоях магнитной пленки. Рисунок 5.5, на котором изображена конфигурация основного состояния на интерфейсе (a) и на внутреннем слое (b), наглядно демонстрирует этот вывод.



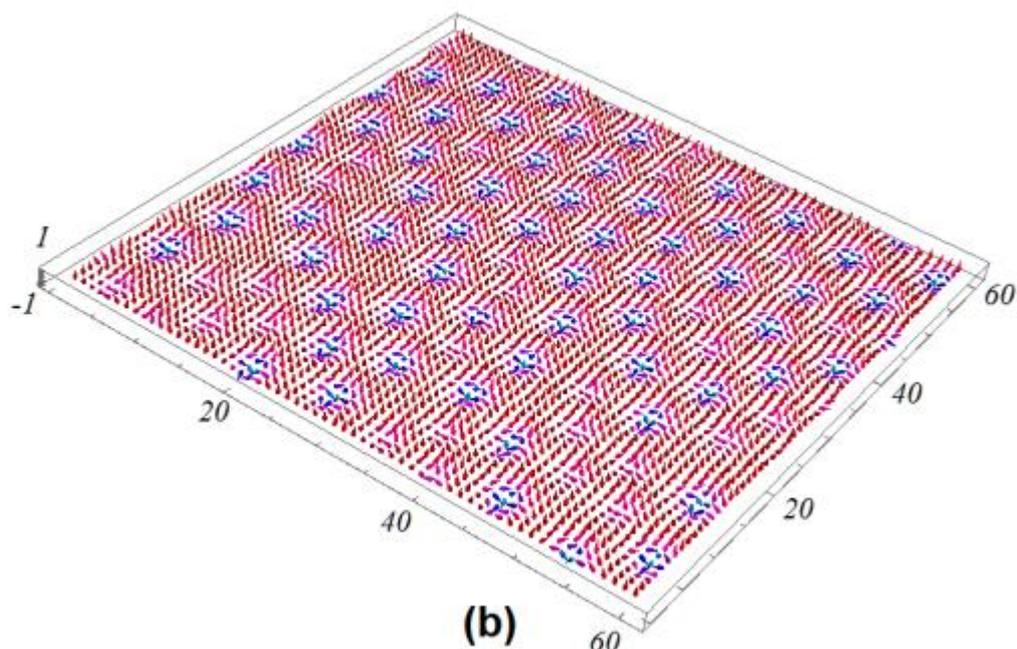


Рис. 5.5. (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки для фрустрированной сверхрешетки  $J^{2m} = J^{2f} = -0.3$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ , (б) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на внутреннем слое магнитной пленки.

Максимально допустимое значение параметров обменного взаимодействия между следующими за ближайшими соседними узлами, или иными словами, максимальная фрустрация, когда можно наблюдать структуру скирмиона, это значение  $J^{2m} = J^{2f} = -0.4$ , близкое к критическому значению  $J^{2m} = J^{2f} = -0.5$ . Этот частный случай представлен на рисунке 5.6, на котором изображена конфигурация основного состояния на интерфейсе (а) и на внутреннем магнитном слое (б). Остальные параметры равны тем же значениям, то есть  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ .

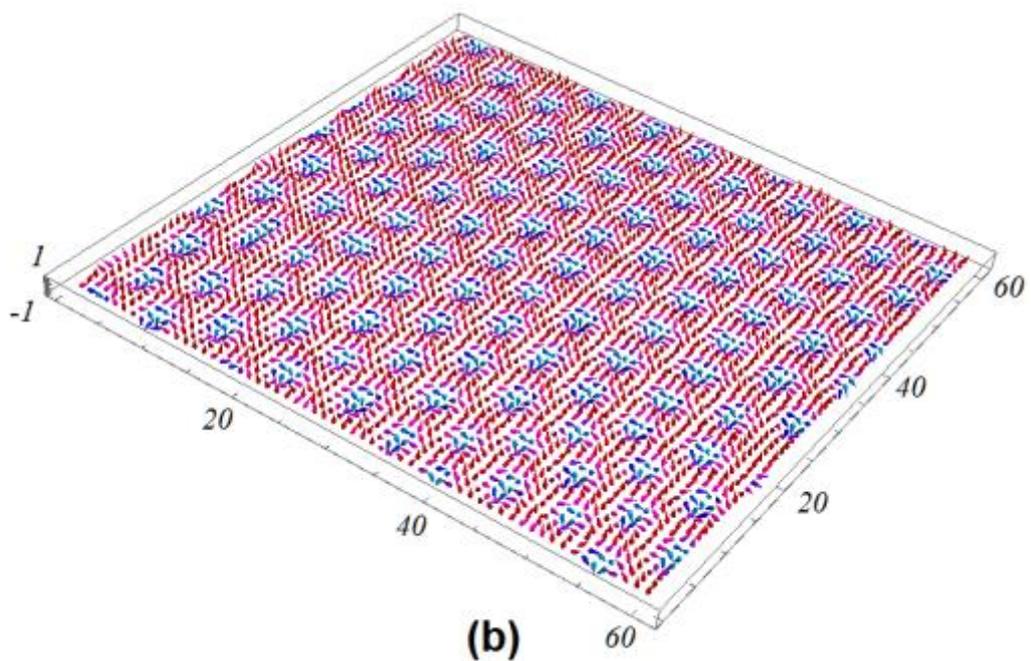
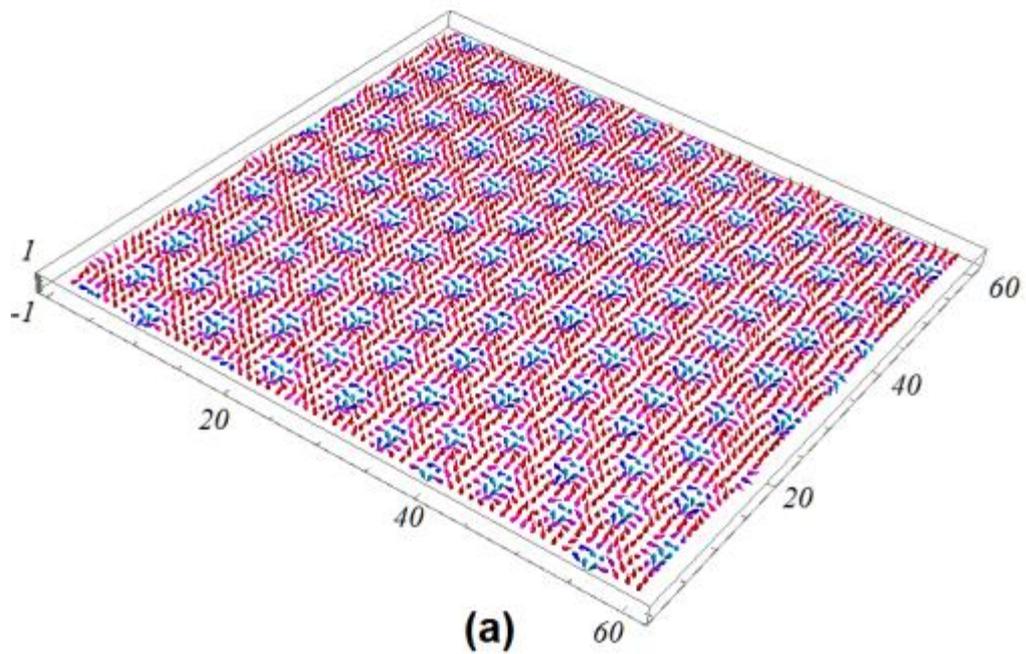


Рис. 5.6. Случай максимально допустимой фрустрации  $J^{2m} = J^{2f} = -0.4$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ , (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки (б) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на внутреннем слое магнитной пленки.

Как видно из Рис. 5.6., спиновая конфигурация в основном состоянии образует строго периодическую скирмионную структуру, или, так называемый скирмионный кристалл. Наличие сильной фрустрации способствует и играет ключевую роль в формировании скирмионной периодической структуры, которая образуется не только на поверхностном магнитном слое сверхрешетки, а во всей толщине магнитной пленки. В отличие от ранее рассмотренных случаев, когда не принимается во внимание фрустрация в ферромагнитной пленке или пренебрегалось антиферромагнитным взаимодействием между NNN соседями (следующими за ближайшими), в данном случае, когда фрустрация в магнитной и ферроэлектрической пленках очень сильна, мы видим, что большое количество скирмионов распределено по всем магнитным слоям с определенной периодичностью и формируется структура, близкая к идеальному кристаллу.

До сих пор в расчетах конфигурации основного состояния по умолчанию предполагалось, что  $J^{2m} = J^{2f}$ , но, как можно доказать, на формирование скирмионов фрустрации магнитной пленки влияют гораздо сильнее, чем наличие фрустрации в сегнетоэлектрической пленке. Фрустрации в сегнетоэлектрической пленке влияют только на стабильность поляризаций на границе раздела сегнетоэлектрической и магнитной пленок. В интервале значений NNN - взаимодействий  $J^{2f} \in (-0.5, 0]$ , наличие сегнетоэлектрической фрустрации  $J^{2f}$  совершенно не сказывается на спиновой конфигурации. На рис. 5.7 показана конфигурация основного состояния на интерфейсе и внутреннем магнитном слое для различных значений NNN – взаимодействий:  $J^{2m} = -0.3$  и  $J^{2f} = -0.1$  (другие параметры:  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ ). Можно видеть, что структура конфигурации основного состояния и количество скирмионов на интерфейсе не отличается от случая ( $J^{2m} = J^{2f} = -0.3$ ), показанного на рис. 5.5.

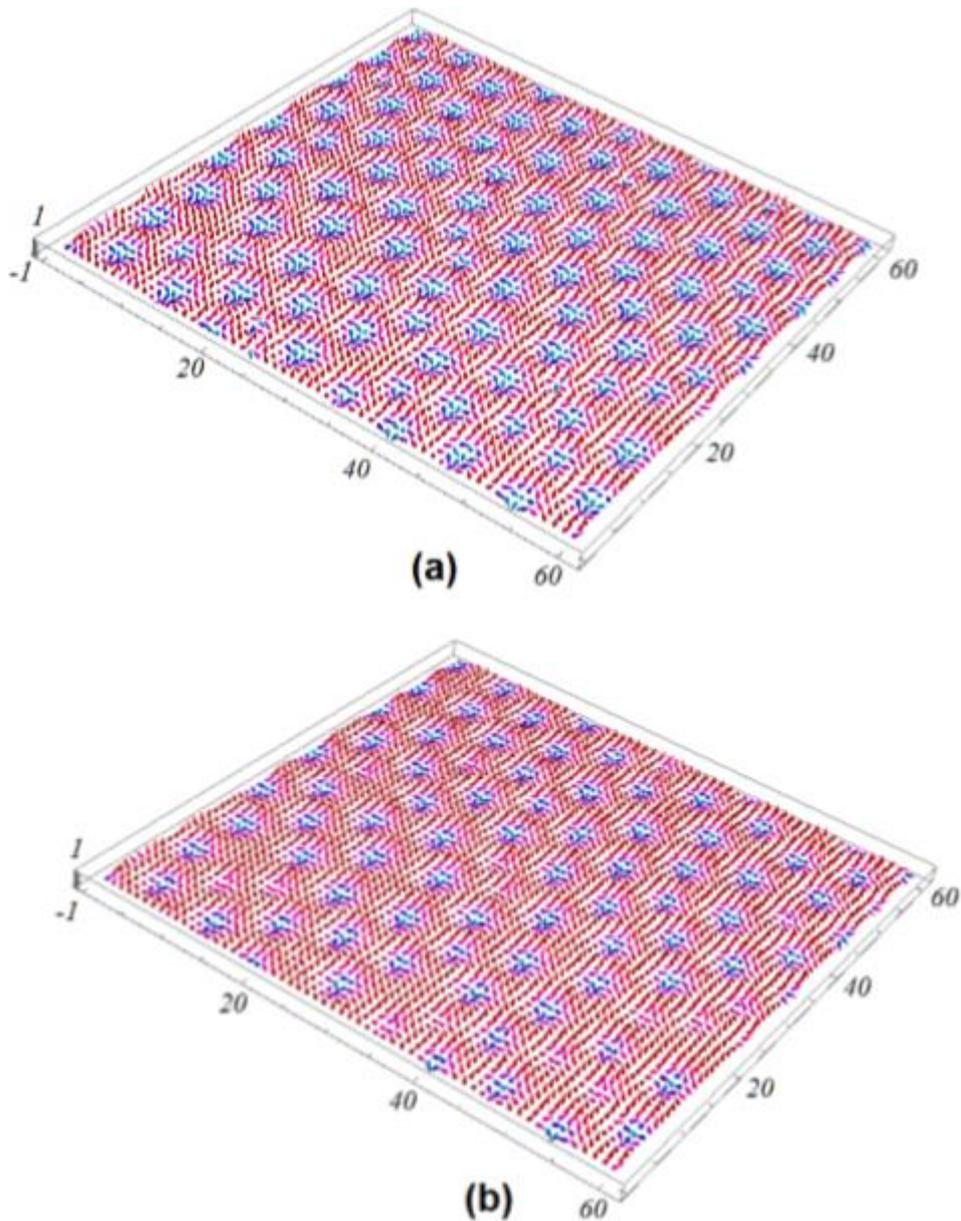


Рис. 5.7. (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки для фрустрированной сверхрешетки  $J^{2m} = -0.3$ ,  $J^{2f} = -0.1$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ , (б) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на внутреннем слое магнитной пленки.

На Рис. 5.8 изображена трехмерная конфигурация основного состояния на интерфейсном слое магнитной пленки для другого частного случая и отличающихся значений параметров  $J^{2m}$  и  $J^{2f}$ , а именно  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = -0.1$ , и для случая сверхрешетки, состоящей из сильно фрустрированной магнитной пленки и нефрустрированной ферроэлектрической:  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = 0$ .

Анализ основного состояния позволяет сделать вывод о том, что если магнитная пленка достаточно фрустрирована, фрустрация в ферроэлектрической пленке уже не играет роли в формировании скирмионной структуры.

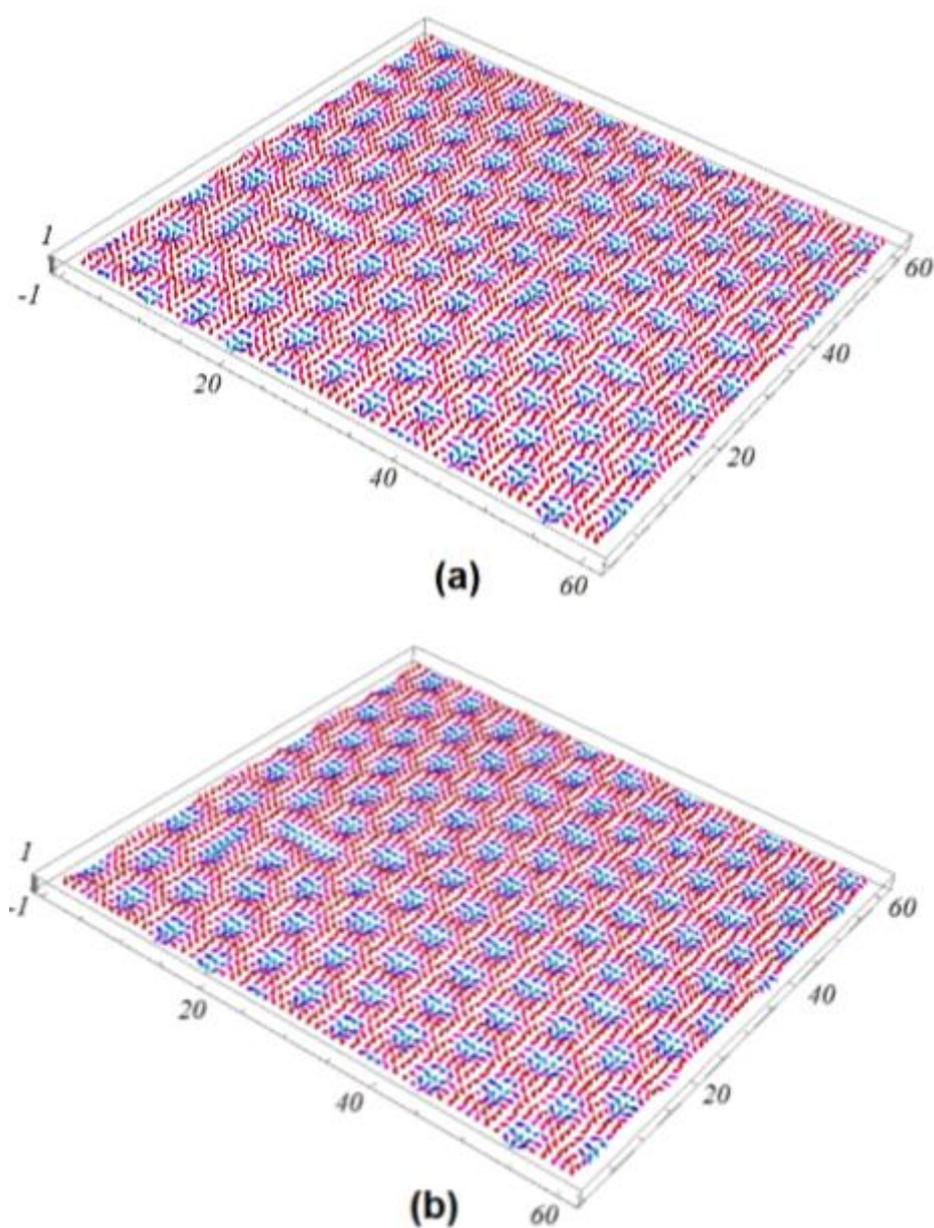


Рис. 5.8. (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки для случая  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = -0.1$ , (б) Трех-

мерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки при  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = 0$ . В обоих случаях принято, что  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ .

В случае, если магнитная пленка является слабофрустрированной, фрустрация в ферроэлектрической пленке играет, напротив, определяющую роль. На рисунке 5.9а приведена конфигурация основного состояния магнитного интерфейса для соотношения параметров NNN - взаимодействий следующих ближайших соседних спинов  $J^{2m} = -0.1$ ,  $J^{2f} = -0.3$ , а на рисунке 5.9 б показана конфигурация уже для  $J^{2m} = -0.1$ ,  $J^{2f} = -0.4$ .

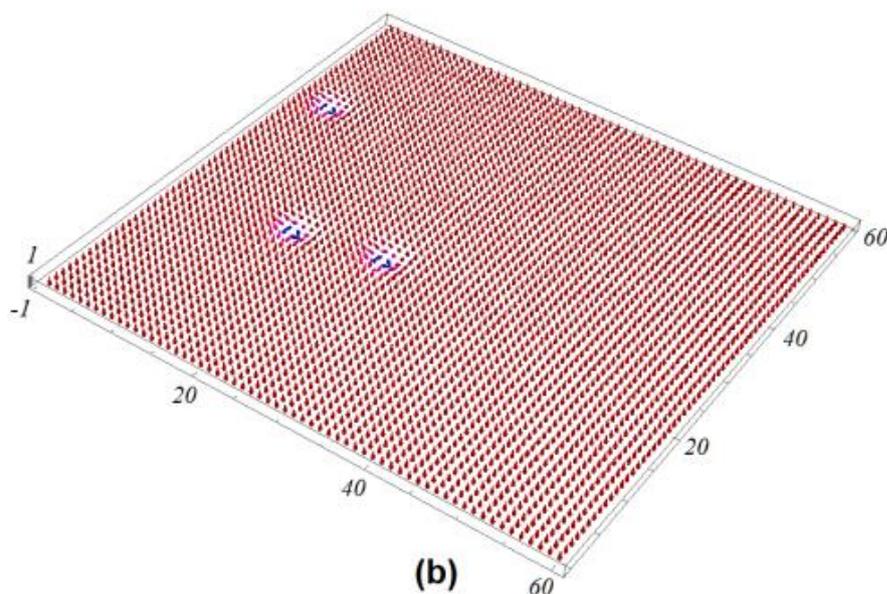
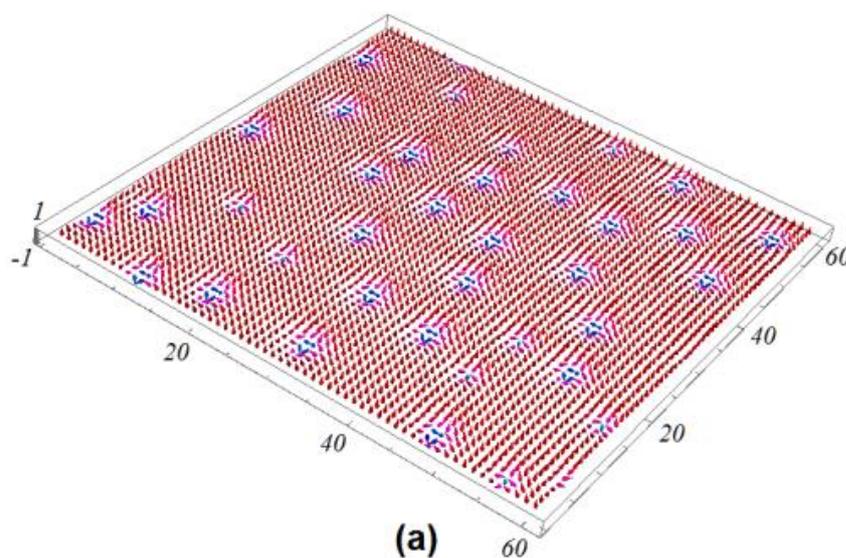


Рис. 5.9. (а) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки для случая  $J^{2m} = -0.1$ ,  $J^{2f} = -0.3$ , (б) Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной пленки при  $J^{2m} = -0.1$ ,  $J^{2f} = -0.4$ . В обоих случаях принято, что  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.25$ ,  $H = 0.25$ .

Мы видим, что в последнем случае конфигурация основного состояния практически ферромагнитна, и скирмионная структура практически перешла в ферромагнитный дальний порядок. Сравнение данного результата со случаем сильно фрустрированных обеих подсистем  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = -0.4$  (Рис. 5.6), где скирмионы образуют периодическую структуру как на интерфейсе, так и во внутренних слоях, позволяет сделать следующее заключение: в то время как магнитная фрустрация  $J^{2m}$  способствует образованию и стабилизации скирмионов, фрустрация в сегнетоэлектрической пленке, при наличии слабой магнитной фрустрации, имеет тенденцию подавлять скирмионную структуру. Таким образом, механизм конкуренции параметров NNN – взаимодействий  $J^{2m}$  и  $J^{2f}$  является довольно сложным.

Интересна стабильность скирмионной фазы по отношению к действию постоянного внешнего магнитного поля. В нашей работе [173] было показано для случая нефрустрированной свехрешетки с простой кубической решеткой, что скирмионная фаза разрушается при воздействии внешнего магнитного поля напряженностью больше, чем  $H = 0.4$ . В данном случае, когда мы рассматриваем свехрешетку, образованную фрустрированными магнитной и ферроэлектрической пленками, скирмионная структура на интерфейсе стабильна вплоть до значений напряженности внешнего магнитного поля  $H = 1.0$  (см. Рис. 5.10). При  $H > 1.0$  все спины выравниваются по направлению внешнего магнитного поля.

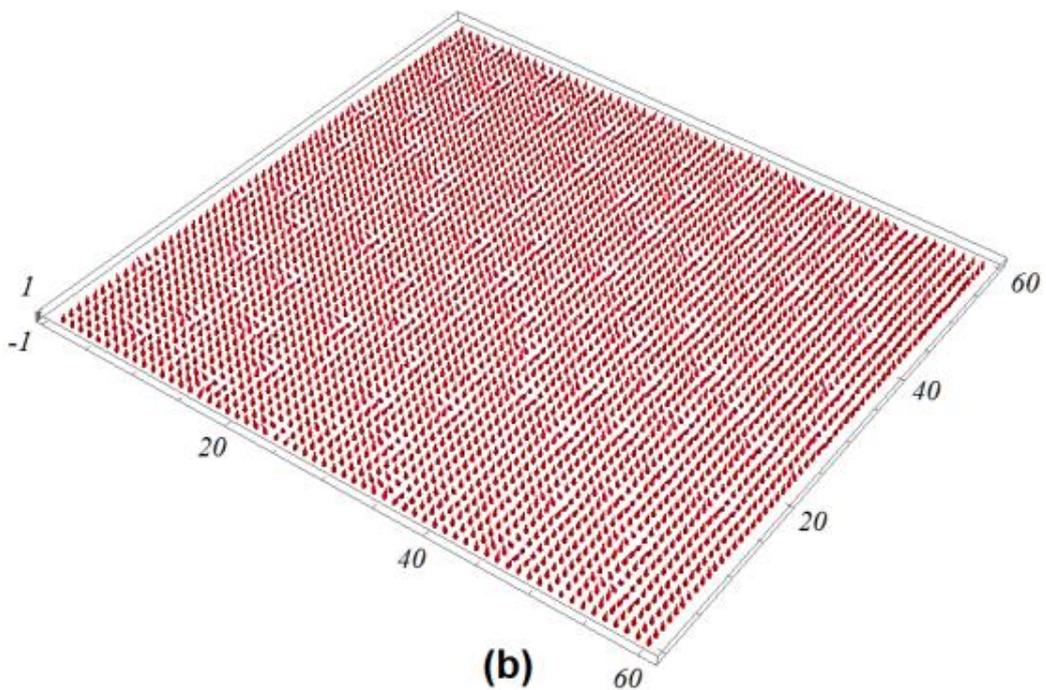
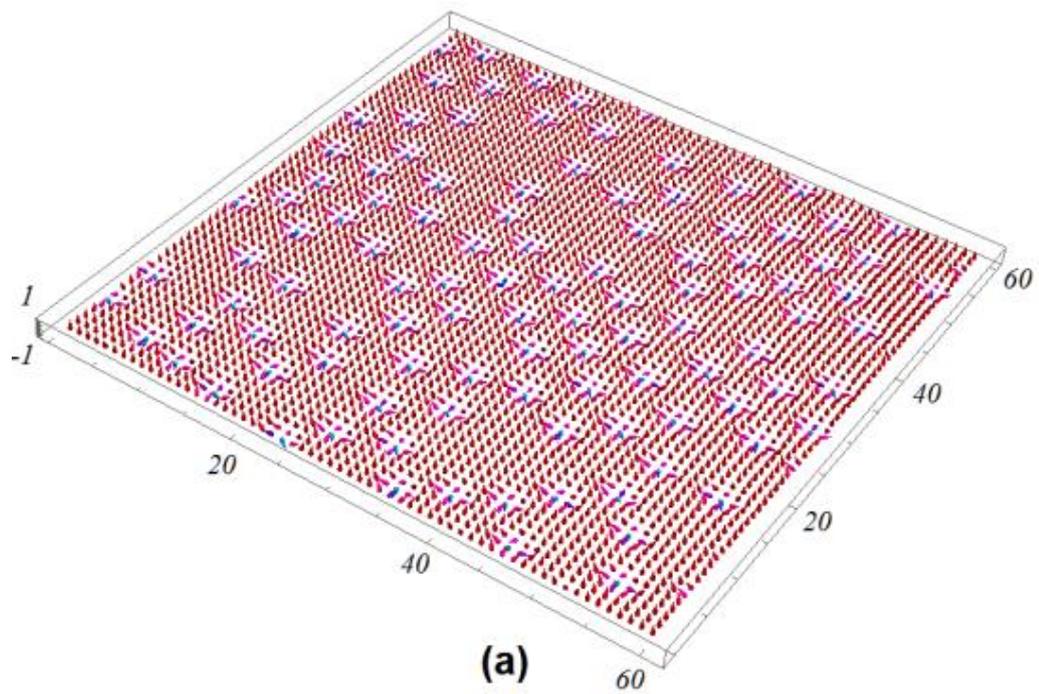


Рис. 5.10.  $H = 1.0$  Трехмерная визуализация конфигурации основного состояния (a) на интерфейсе (b) на внутренних слоях магнитной пленки. Параметры моделирования  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{2m} = -0.4$ ,  $J^{2f} = -0.4$  и  $J^{mf} = -1.25$ .

Фазовая диаграмма в координатах  $J^{2m} - J^{mf}$  для параметров в случае  $J^m = J^f$ ,  $J^{2m} = J^{2f}$  и  $H = 0.25$  показана на Рис. 5.11а. Отметим, что в области

значений  $J^{mf} \in [0, -0.6]$  скирмионы не формируются ни при наличии фрустрации, ни в случае их отсутствия. В области  $J^{mf} \in [-0.6, -1.1]$  скирмионы образуются при ненулевых значениях параметра  $J^{2m}$  антиферромагнитного обменного взаимодействия пар спинов, следующих за ближайшими соседними.

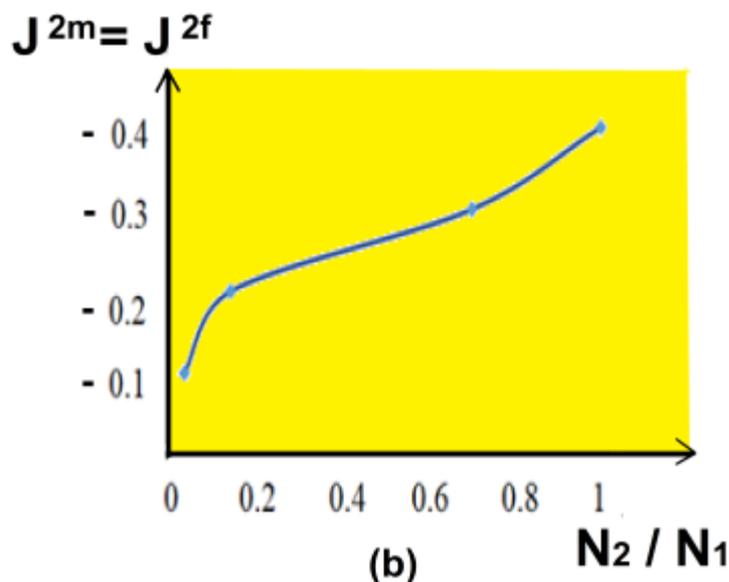
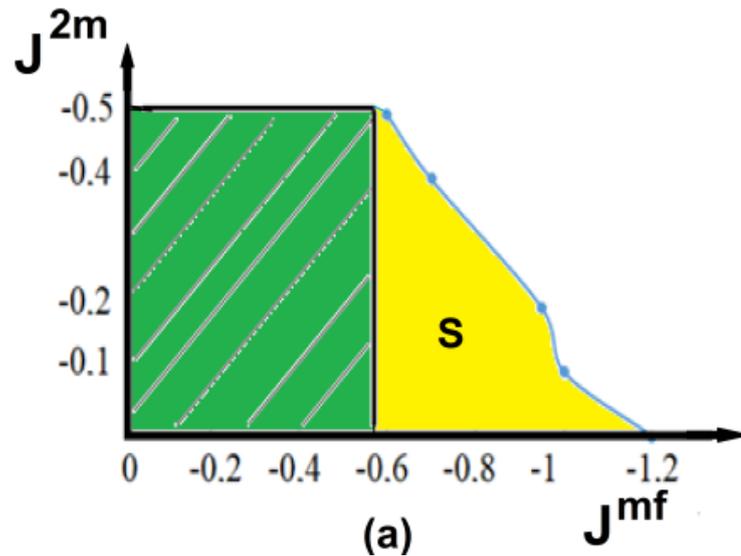


Рис. 5.11. (a) Фазовая диаграмма в координатах  $J^{2m} - J^{mf}$  для параметров в случае  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{2m} = J^{2f}$  и  $H = 0.25$ . Скирмионная фаза обозначена буквой S и окрашена в желтый цвет (комментарии в тексте) (b) Зависимость отношения числа скирмионов  $N_2$  на внутренних слоях магнитной пленки и числа скирмионов на интерфейсе  $N_1$ .

Увеличивая параметр  $J^{2m}$ , то есть фрустрации в магнитных пленках, при значении параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} = -1.2$ , скирмионы формируют периодическую решетку на поверхности. На рис. 5.10 b показана функциональная зависимость параметра  $J^{2m} = J^{2f}$  от соотношения числа скирмионов  $N_2$  на внутренних слоях магнитной пленки и числа скирмионов на интерфейсе  $N_1$ . Видно, что при усилении фрустрации в свехрешетке, отношение  $N_2/N_1$  стремится к единице.

Если сравнить полученные результаты с теоретическими исследованиями скирмионов в фрустрированных магнетиках [204], то следует отметить, что в каждой из указанных работ использовались разные модели, поэтому сравнение представляется весьма затруднительным. Однако во всех указанных источниках продемонстрированы очень похожие текстуры скирмионов по размерам. Поскольку в каждом из материалов формируется баланс различных конкурирующих взаимодействий, то сопоставить результаты и выполнить анализ не просто. Однако, можно отметить, что визуализация экспериментальных данных демонстрирует аналогичные топологические объекты с совпадающими размерами и областью устойчивого существования.

### § 3. Фазовые переходы в скирмионном фрустрированном кристалле

Магнитные фазовые переходы в сверхрешетке происходят под воздействием конкуренции между температурой  $T$ , магнитоэлектрическим взаимодействием (а именно  $\langle P_k \rangle$ ), внешним магнитным полем  $\langle H \rangle$  и скирмионной структурой. Сильное магнитоэлектрическое взаимодействие, то есть большое абсолютное значение величины  $\langle P_k \rangle$  способствует стабилизации скирмионного состояния в спиновой конфигурации основного состояния на интерфейсе магнитной и сегнетоэлектрических пленок. Поэтому в расчетах принимается, как и в предыдущем параграфе, что на границе магнитной и ферроэлектрической подсистем действует сильное магнитоэлектрическое взаимодействие.

Моделирование фазовых переходов в системе при ненулевых температурах, производится с помощью алгоритма Метрополиса [139, 98]. Расчеты выполнены для системы с различными размерами  $N \times N \times L$ , где  $N = 40, 60, 80, 100$ . Толщина сверхрешетки  $L$  принимает значения  $L = 4, 8, 12, 16, 20, 24$ . Следует отметить, что изменение латеральных размеров плоскости  $N$  в указанном диапазоне не влияет на результаты вычисляемых параметров. И напротив, толщина сверхрешетки существенным образом влияет на основное состояние в системе. С увеличением толщины, то есть числа слоев в магнитной и сегнетоэлектрической пленке от  $L_m = L_f = 4$  до  $L_m = L_f = 8$ , скирмионная структура возникает только на поверхности и близких к поверхности слоях, а не в толще магнитной пленки. Поэтому в большинстве выполненных расчетов размеры системы задавались как  $N = 60$  и  $L_m = L_f = 4$ . При  $L_m = L_f = 4$  скирмионы наблюдались в том числе и в двух внутренних слоях магнитной пленки (см. предыдущий параграф). На каждом узле выполнялось  $10^6$  Монте-Карло итераций для того, чтобы система достигла состояния термодинамического равновесия, затем для статистического усреднения вычисляемых физических величин, таких как энергия, параметры порядка, выполнялось еще  $10^6$  Монте-Карло шагов на каждом узле. В работе [203] было показано, что такие большие параметры или времена достижения

равновесия и статистического усреднения для моделирования методом Монте-Карло, необходимы для стабилизации скирмионного кристалла в двумерной магнитной пленке с учетом взаимодействия Дзялошинского-Мории, принятом во внимание и в рассматриваемой модели.

Для ферроэлектрических слоев в силу коллинеарности основного состояния, параметр порядка  $M_f(n)$   $n$ -го слоя сегнетоэлектрической пленки, определяется следующим образом

$$M_f(n) = \frac{1}{N^2} \left\langle \left| \sum_{i \in n} P_i^z \right| \right\rangle, \quad (5.8)$$

где знак  $\langle \dots \rangle$  означает статистическое усреднение.

Для магнитной пленки, где основное состояние не коллинеарно, нахождение параметра порядка является нетривиальной задачей. Один из способов нахождения параметра порядка для неколлинеарного случая предложен в работе [173]. Для этого предлагается увеличивать температуру системы исходя из вычисленной конфигурации основного состояния. При каждом шаге повышения температуры определяем спиновую конфигурацию при температуре  $T$  и в момент времени  $t$ . Спиновая конфигурация определяется после вычисления локального поля, действующего на каждый спин со стороны его окружения, затем рассматриваемый спин выравнивается по направлению локального поля, полученную спиновую конфигурацию записываем в массив состояний. Затем полученная спиновая конфигурация при температуре  $T$  и в момент времени  $t$  проецируется на спиновую конфигурацию основного состояния. Тогда параметр порядка для  $n$ -го слоя магнитной пленки рассчитывается согласно формуле

$$M_m(n) = \frac{1}{N^2(t_a - t_0)} \sum_{i \in n} \left| \sum_{t_0}^{t_a} \mathbf{s}_i(T, t) \cdot \mathbf{s}_i^0(T = 0) \right|, \quad (5.9)$$

здесь  $\mathbf{S}_i(T, t)$  – вектор спина  $i$ -го узла при температуре  $T$  в момент времени  $t$ ,  $\mathbf{S}_i^0(T = 0)$  – вектор спина на этом же узле при  $T = 0$ , то есть в основном состоянии. Таким образом, параметр порядка  $M_m(n)$  близок к единице при очень низких температурах, когда ориентация каждого спина на узлах близка к ориентации соответствующих спинов в основном состоянии. При возрастании температуры, флуктуации спинов на каждом узле сверхрешетки возрастают, и  $M_m(n)$  становится равной нулю.

Заметим, что  $M_m(n)$  определяется аналогично параметру Эдвардса – Андерсона (Edwards–Anderson order parameter) в так называемых спиновых стеклах. Параметр порядка Эдвардса-Андерсона рассчитывается усреднением спина на каждом узле по времени. Когда система поддерживается при низкой температуре (замороженные спины) усреднение по времени не равно нулю. При нагревании системы, флуктуации спинов около положения основного состояния со временем возрастают, в результате чего среднее равно нулю. И параметр порядка Эдвардса-Андерсона представляет собой сумму квадратов каждого усредненного спина. В результате он определяет степень «замороженности» системы, но никак не вид упорядочения.

Также обратим внимание на то, что если система выполняет «глобальное вращение» во время вычислительного процесса, то

$$\sum_{t_0}^{t_a} \mathbf{S}_i(T, t) \cdot \mathbf{S}_i^0(T = 0) = 0$$

при усреднении на длительном временном интервале. При вычислении в рамках заданного количества итераций на каждом узле «глобальное вращение» не обнаруживается. Это подтверждается вычислением времени релаксации, для симуляции «бесконечного» времени наблюдения за свойствами системы, аналогично тому как масштабирование конечных размеров позволяет заменить вычисление и симуляции систем с бесконечными размерами. Вычислено время релаксации двумерного скирмионного кристалла (сверхрешетка,

состоящая из однослойных сегнетоэлектрической и магнитной пленки), с использованием параметра порядка (5.9), и оно указывает на то, что скирмионы достигают состояния статистического равновесия при количестве итераций на узле (так называемое количество Монте-Карло шагов на спин) превышающем чем  $10^6$ . А зависимость параметра порядка (5.9) от температуры имеет экспоненциальный характер, как и параметр порядка Эдвардса – Андерсона для спиновых стекол при  $T < T_C$ .

Другим способом проверки стабильности скирмионной кристаллической структуры является численный расчет топологического заряда, в окружении каждого скирмиона. При фазовом переходе топологический заряд, который будет выступать в качестве параметра порядка, меняется с возрастанием температуры и устремляется к нулю при фазовом переходе.

Общие параметры порядка для магнитной и сегнетоэлектрической пленки сверхрешеток представляют собой сумму параметров  $M_m$  и  $M_f$  по количеству слоев в соответствующей пленке.

То есть

$$M_m = \sum_n M_m(n)$$

$$M_f = \sum_n M_f(n).$$

На рисунке 5.12 изображены зависимость энергии магнитной подсистемы и магнитного параметра порядка в зависимости от температуры для различных  $J^{2m}$  - параметров антиферромагнитного взаимодействия спинов на узлах, следующих за ближайшими соседними узлами. Фазовый переход в магнитной пленке происходит при температуре, соответствующей изменению хода графика зависимости энергии от  $T$ . Эта температура соответствует максимуму теплоемкости.

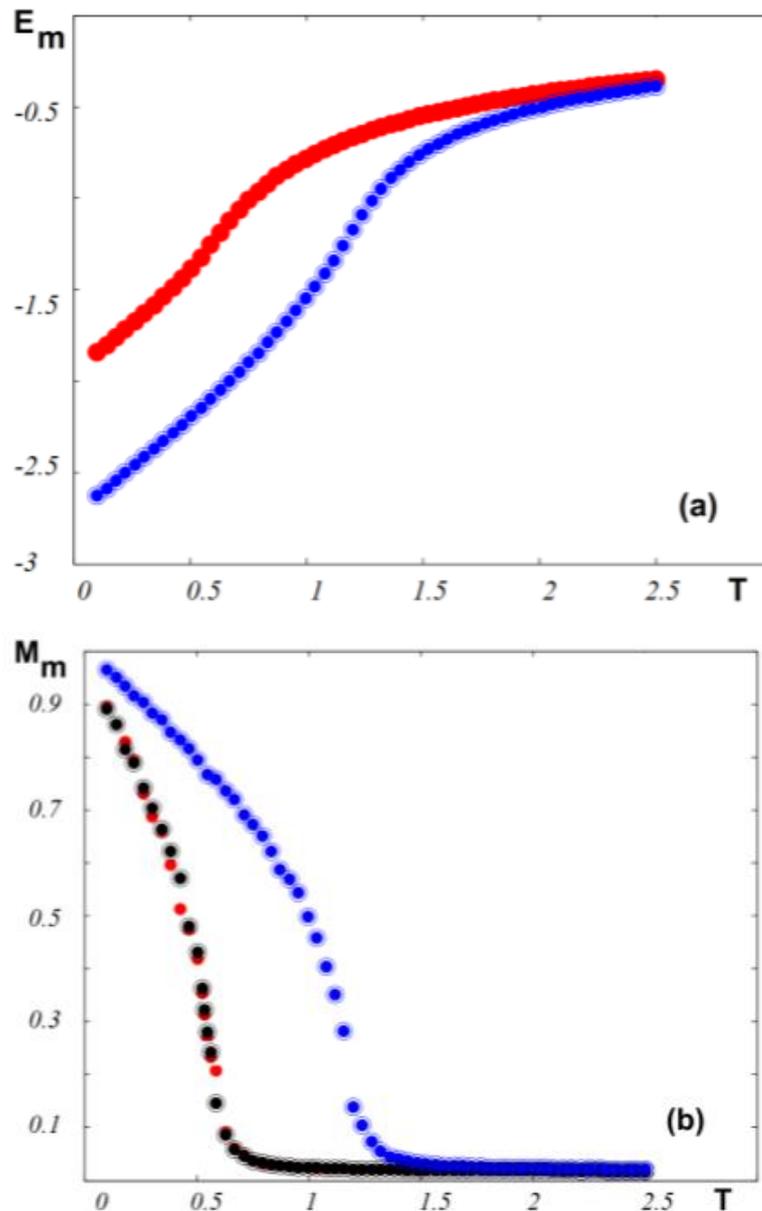


Рис. 5.12. (а) Зависимость энергии магнитной пленки от температуры  $T$  для ( $J^{2m} = J^{2f} = -0.4$ ) (красная линия), совпадает со случаем ( $J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0$ ) (черная линия, полностью совпадает с красной). Голубая линия соответствует набору значений ( $J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4$ ). (б) Зависимость параметра порядка магнитной пленки от температуры для ( $J^{2m} = J^{2f} = -0.4$ ) (красная линия), ( $J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0$ ) (черная линия), и ( $J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4$ ) (голубая линия). Остальные параметры равны  $J^m = J^f = 1, J^{mf} = -1.25, H = 0.25$ .

Зависимость энергии от температуры (красная линия на рис. 5.12а) полностью совпадает для различных значений фрустраций в сегнетоэлектрической пленке, то есть разным параметров  $J^{2f}$ , ( $J^{2m} = J^{2f} = -0.4$ ) и ( $J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0$ ). Изменение хода кривой имеет место при  $T_C^m \cong 0.60$ . Это означает, что фрустрация сегнетоэлектрической пленки не влияет так сильно на скирмионные магнитные переходы, при сильной фрустрации в магнитной пленке ( $J^{2m} = -0.4$ ). Для случая, когда магнитная пленка ферромагнитна и не фрустрирована, но фрустрирована сегнетоэлектрическая пленка ( $J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4$ ), фазовый переход происходит в магнитной пленке при гораздо более высокой температуре  $T_C^m \cong 1.25$ .

Результаты расчетов приведены в безразмерных единицах для удобства. Так энергия измеряется в единицах  $J^m$ , а температура в единицах  $J^{2m}/k_B$ . Поэтому расчеты могут быть адаптированы и использованы для материалов с различными  $J^m$ . Например, если известно, что в сверхрешетке с определенным стехиометрическим составом скирмионные фазовые переходы происходят при  $T_C^{exp} = 200 \text{ K}$ , используя данный экспериментальный факт, мы можем рассчитать эффективный обменный параметр  $J_{eff}$ , воспользовавшись, например, уравнением среднего поля

$$T_C^{exp} = \frac{2}{3k_B} Z \cdot S \cdot (S + 1) J_{eff} \quad (5.10)$$

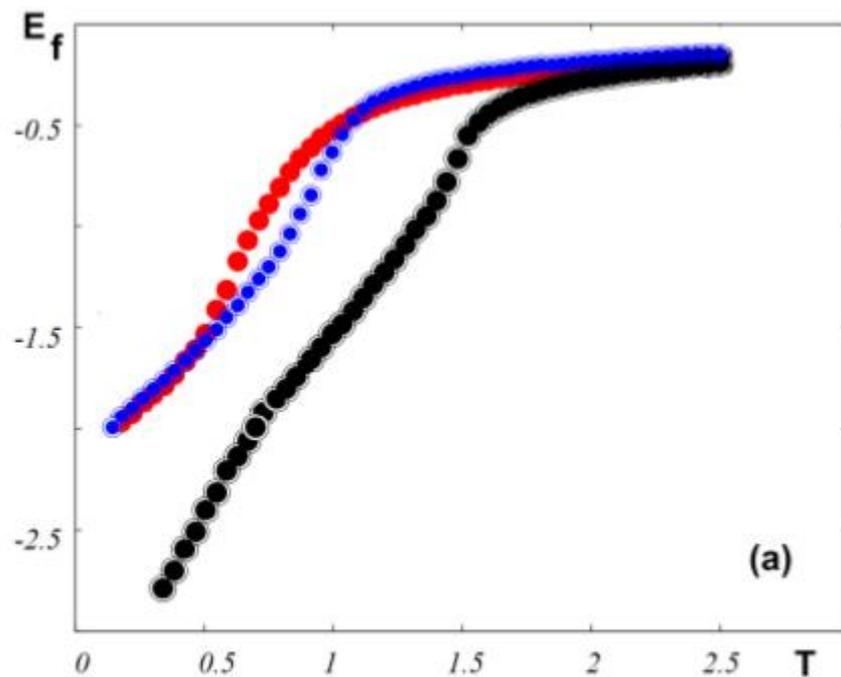
$$J_{eff} = 34.51 \times 10^{-23} \text{ Дж} = 47.63 \text{ K}. \quad (5.11)$$

Здесь принято, что  $Z = 6$  (простая кубическая решетка),  $S = 1$  (модуль вектора спина) и  $k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ Дж/К}$ .  $J_{eff}$  – некоторое соотношение между величинами  $J^m$ ,  $J^{2m}$  и  $J^{mf}$ . Зная основное состояние можно вывести данное соотношение. Можно рассчитать энергию в джоулях умножением значения  $E_m$  на рисунке 5.12 на значение  $J^m$ .

Зависимость параметра порядка магнитной пленки (Рис. 5.12b) от температуры показывает, что в магнитной подсистеме происходит фазовый

переход второго рода из скирмионной фазы в ферромагнитную при критических температурах, совпадающих с температурами, при которых наблюдается изменение хода кривой зависимости энергии от температуры (Рис. 5.12а).

На рисунке 5.13а показана зависимость энергии сегнетоэлектрической пленки и суммарной поляризации слоев для того же самого набора параметров взаимодействий, определяющих фрустрацию в сверхрешетке:  $(J^{2m} = J^{2f} = -0.4)$ ,  $(J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0)$ ,  $(J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4)$ . Можно видеть, что в случае сильной фрустрации в магнитной пленке (первый и второй случай) критические температуры для сегнетоэлектрической пленки равны  $T_c^f \cong 0.60$  и  $0.90$  соответственно.



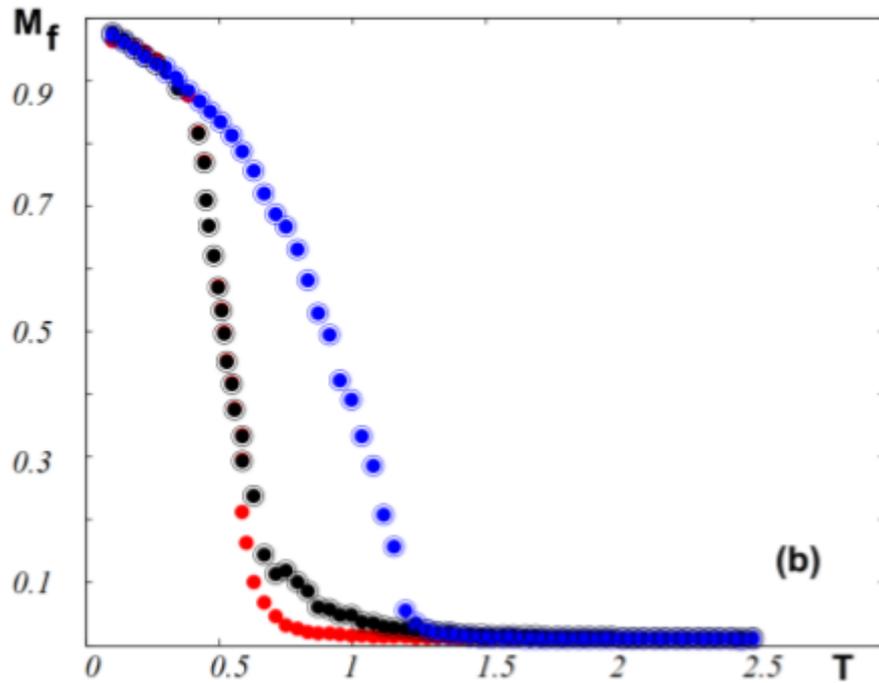


Рис. 5.13 (а) Зависимость энергии сегнетоэлектрической пленки от температуры  $T$  для  $(J^{2m} = J^{2f} = -0.4)$  (красная линия),  $(J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0)$  (черная линия),  $(J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4)$  (голубая линия). (б) Зависимость параметра порядка сегнетоэлектрической пленки от температуры для  $(J^{2m} = J^{2f} = -0.4)$  (красная линия),  $(J^{2m} = -0.4, J^{2f} = 0)$  (черная линия), и  $(J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4)$  (голубая линия). Остальные параметры равны  $J^m = J^f = 1, J^{mf} = -1.25, H = 0.25$ .

Это значит, что фрустрация в сегнетоэлектрической пленке, которая при наличии сильной магнитной фрустрации, не влияет на переходы из скирмионной фазы в ферромагнитную, но сильно влияет на сегнетоэлектрический переход. При этом чем больше сегнетоэлектрическая фрустрация, тем ниже температура перехода. При отсутствии магнитной, но при наличии сильной сегнетоэлектрической фрустрации  $J^{2m} = 0, J^{2f} = -0.4$ , фазовый переход в сегнетоэлектрической пленке происходит при температуре  $T_C^f \cong 1.50$ . На рис. 5.13 б показан график зависимости  $M_f$  от температуры, температуры переходов на графиках на Рис. 5.13 а и Рис. 5.13 б совпадают.

#### § 4. Выводы к главе

В этой главе рассмотрено влияние фрустрации и киральной модели магнитоэлектрической связи в магнитных и сегнетоэлектрических слоях магнито-сегнетоэлектрической сверхрешетки. Магнитоэлектрическое взаимодействие учитывалось на границе фрустрированных ферромагнитной и сегнетоэлектрических пленок. Мы показали, что в основном состоянии формируется скирмионная кристаллическая структура под воздействием фрустрации, магнитоэлектрического взаимодействия и приложенного внешнего магнитного поля в большой области параметров в пространстве  $(J^{2m}, J^{mf})$ . Предполагается, что магнитная фрустрация увеличивает вероятность возникновения скирмионов, в то время как, например, достаточно сильные фрустрации в сегнетоэлектрической подсистеме дестабилизируют скирмионную структуру даже при наличии слабых фрустраций в магнитной системе. Исследованы фазовые переходы в скирмионном кристалле с помощью метода Монте-Карло. Показано, что скирмионы стабильны при конечных температурах. Установлено, что несмотря на то, что магнитная фрустрация способствует возникновению скирмионов, она при этом значительно снижает температуру перехода. Существование достаточно стабильных скирмионов, ограниченных магнито-сегнетоэлектрическим интерфейсом при конечной  $T$ , может иметь потенциал для применения в спинтронике. Многие возможности для практического применения на основе скирмионов, были упомянуты во введении. В качестве последнего замечания отметим, что существующая модель магнитоэлектрической сверхрешетки может быть использована в случаях магнитных монослоев или бислоев для изучения динамики скирмионов, вызванных спин-поляризованным током или вращающим моментом переноса спина. Из-за малой толщины скирмионы, создаваемые областями интерфейса, хорошо ограничены в  $x$ у – плоскости. Поэтому модель подходит для описания пиннинга скирмионов с использованием электрического поля, действующего на сегнетоэлектрические поляризации.



## Заключение

Диссертационная работа посвящена разработке и исследованию различных моделей магнитоэлектрического взаимодействия, а также влияния внешних полей и фрустраций для управляющего воздействия на топологические магнитные вихри и скирмионы на интерфейсах сверхрешеток мультиферроиков.

В работе исследуется влияние внешних магнитного и электрического полей на магнитоэлектрическую подсистему орторомбического антиферромагнитного сегнетомагнетика.

Найдены, с учетом линейного по внешнему электрическому полю магнитоэлектрического эффекта, зависимости параметра магнитоэлектрического взаимодействия, а также спектр связанных сегнетомагнитных волн в орторомбических сегнетомагнетиках от приложенного внешнего магнитного и электрического полей.

Исследована зависимость энергетического спектра, спонтанной намагниченности и спиновой теплоемкости орторомбического сегнетомагнетика с двумя магнитными и двумя сегнетоэлектрическими подрешетками от внешних полей. На основе метода функций Грина и диаграммной техники, получены температурные и полевые зависимости затухания спиновых волн. Методом теории возмущений и диаграммной техники для функции Грина определен вклад в свободную энергию для взаимодействующих магнонов, определено затухание магнонов, обусловленное процессами слияния и распада магнонов друг с другом и фононами, также рассмотрена их температурная и полевая зависимости.

Исследовано влияние температуры, внешних магнитных и электрических полей, параметров магнитоэлектрической связи ближайших соседей и соседей, следующих за ближайшими в сверхрешетке мультиферроика, образованной чередующимися магнитными и сегнетоэлектрическими пленками.

Выполнено моделирование методами Монте Карло для исследования температурных зависимостей различных физических величин, для анализа фазовых переходов, происходящих в каждой подсистеме, а также влияния на эти процессы магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе двух подсистем и приложенных магнитных и электрических полей.

Обнаружено изменение характера фазового перехода при увеличении величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия. Построены фазовые диаграммы, которые показывают тесную взаимосвязь магнитных и сегнетоэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу и отличающиеся значения температур переходов внутри пленок и на поверхностных слоях.

Предложена новая модель магнитоэлектрической связи между магнитной пленкой и сегнетоэлектрической пленкой в сверхрешетке. Эта связь имеет вид кирального магнитоэлектрического взаимодействия между дипольным моментом сегнетоэлектрической пленки и спинами в плоскости магнитной пленки на границе раздела сверхрешетки мультиферроика. Обнаружены, с помощью метода наискорейшего спуска, состоящего в минимизации энергии сверхрешетки, формируются однородные неколлинеарные спиновые конфигурации в отсутствие внешнего магнитного поля. Определены условия переходов таких конфигураций в скирмионы в приложенном магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости пленки.

Выполнено моделирование методами Монте-Карло для исследования фазовых переходов, происходящих в сверхрешетке с учетом и без учета внешних электрического и магнитного полей. Показано, что скирмионы могут быть стабильны при ненулевых температурах.

Показано впервые, что тип фазового перехода может быть второго или первого порядка, в зависимости от параметра связи на интерфейсе сверхрешетки. Существование скирмионов в многослойных сверхрешетках ограни-

ченных магнито-сегнетоэлектрической границей, является принципиально новым явлением. Обнаруженный эффект может быть использован в транспортных приложениях в устройствах спинтроники.

Получены аналитические выражения для энергии элементарных возбуждений спиновых волн в двумерной и трехмерной магнитной пленке в отсутствии внешнего магнитного поля методом функции Грина. Обнаружено сильное влияние магнитоэлектрической связи на спектр спиновых волн, а также на намагниченность при низких температурах.

Рассмотрено влияние фрустрации и кирального вида модели магнитоэлектрической связи в магнитных и сегнетоэлектрических слоях сверхрешетки типа ферромагнетик / сегнетоэлектрик. Киральный вид модели магнитоэлектрического взаимодействия учитывался на границе фрустрированных ферромагнитной и сегнетоэлектрических пленок.

Показано, что в основном состоянии формируется скирмионная кристаллическая структура под воздействием фрустрации, магнитоэлектрического взаимодействия и приложенного внешнего магнитного поля в большой области параметров в пространстве  $(J^{2m}, J^{mf})$ . Предполагается, что магнитная фрустрация способствует формированию решетки магнитных скирмионов, в то время как, например, достаточно сильные фрустрации в сегнетоэлектрической подсистеме дестабилизируют скирмионную структуру, даже при наличии слабых фрустраций в магнитной системе.

Исследованы фазовые переходы в скирмионном кристалле с помощью метода Монте-Карло. Показано, что скирмионы стабильны до определенных температур.

Установлено, что несмотря на то, что магнитная фрустрация способствует возникновению скирмионов, она при этом значительно снижает температуру перехода. Существование достаточно стабильных скирмионов, ограниченных магнито-сегнетоэлектрическим интерфейсом при конечной  $T$ , может иметь потенциал для применения в спинтронике.

## Список литературы

1. Боголюбов Н.Н. Собрание научных трудов в 12 томах. Статистическая механика том 8. Теория неидеального Бозе - газа, сверхтекучести и сверхпроводимости, 1946—1992 / Н.Н. Боголюбов. — // М.: Наука, 2007. —642 с.
2. Боголюбов, Н.Н. Приближенные методы вторичного квантования в квантовой теории магнетизма / Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов // Известия АН СССР, серия физ. — 1957. — Т. 21. — С. 849.
3. Боголюбов Н.Н. (мл.) Математические методы статистической механики модельных систем / Н.Н. Боголюбов (мл.), Б.И. Садовников, А.С. Шумовский. — // М.: Наука, 1989. —296 с.
4. Sergienko, I. A. Role of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in multiferroic perovskites / I. A. Sergienko, E. Dagotto // Physical Review B. — 2006. — Vol. 73. — № 9. — P. 094434.
5. Астров, Д. Н. Магнитоэлектрический эффект в окиси хрома / Д. Н. Астров // ЖЭТФ. - 1961. - Т. 40. - С. 1035.
6. Folen, V. J. Anisotropy of the Magnetoelectric Effect in Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / V. J. Folen, G. T. Rado, E. W. Stalder // Phys. Rev. Lett. - 1961. - V. 6. - P. 607
7. Rado, G. T. Observation of the Magnetically Induced Magnetoelectric Effect and Evidence for Antiferromagnetic Domains / G. T. Rado, V. J. Folen // Phys. Rev. Lett. - 1961. - V. 7. - P. 310.
8. Smolenskii, G. A. Magnetically ordered ferroelectrics / G. A. Smolenskii, V. A. Bokov, V. A. Isupov, et al. // Helvetica Physica Acta. - 1968. - V. 41. - P. 1187.
9. Смоленский, Г. А. Сегнетомагнетики / Г. А. Смоленский, И. Е. Чупис // УФН. - 1982. - Т. 137. - С. 415.
10. Catalan, G. Physics and Applications of Bismuth Ferrite / G. Catalan, J. F. Scott // Adv. Mater. - 2009. - V. 21. - P. 1.

11. Ascher, E. Some Properties of Ferromagnetoelectric Nickel-Iodine Boracite, Ni<sub>3</sub>B<sub>7</sub>O<sub>13</sub>I / E. Ascher, H. Rieder, H. Schmid, H. Stössel // J. Appl. Phys. -1966. - V. 37. - P. 1404.
12. Scott, J. F. Multiferroic magnetoelectric fluorides: why are there so many magnetic ferroelectrics? / J. F. Scott, R. Blinc // J. Phys.: Condens. Matter. - 2011.- V. 23. - P. 113202.
13. Kimura, H. Magnetically Induced Ferroelectricity in Multiferroic Compounds of RMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> / H. Kimura, S. Kobayashi, S. Wakimoto, et al. // Ferroelectrics. - 2007. - V. 354. - P. 77.
14. Liang, K.-C. Magnetoelectricity in the system RA<sub>13</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (R = Tb, Ho, Er, Tm) / K.-C. Liang, R. P. Chaudhury, B. Lorenz, et al. // J. Phys.: Conf. Ser. - 2012.- V. 400. - P. 032046.
15. Kadomtseva, A. M. Magnetoelectric and magnetoelastic properties of rare-earth ferroborates / A. M. Kadomtseva, Yu. F. Popov, G. P. Vorob'ev, et al. // Low Temp. Phys. - 2010. - V. 36. - P. 511.
16. Розенбаум В.М. Колебательные и ориентационные состояния поверхностных групп атомов. / В.М. Розенбаум, В.М. Огенько, А.А. Чуйко // УФН – 1991. - Т.161 - С.79.
17. Fraerman, A.A. Metastable and nonuniform states in 2D orthorhombic dipole system / A.A. Fraerman, M.V. Sapozhnikov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 1999. - V.192 - P.191.
18. Altbir, D. Dipolar interaction and magnetic ordering in granular metallic materials / D. Altbir, P. Vargas, J. d'Albuquerque e Castro, U. Ra //Phys. Rev. B -1998. - V.57 - P.13604.
19. Hwang, M. Magnetic force microscopy study of interactions in 100 nm period nanomagnet arrays / M. Hwang, M. C. Abraham, T. A. Savas, Henry I. Smith, R. J.Ram, and C. A. Ross // J. Appl. Phys. – 2000. - V.87 - P.5108.
20. Farhoud, M. The effect of aspect ratio on the magnetic anisotropy of particle arrays / M. Farhoud, H. I. Smith, M. Hwang, and C. A. Ross // J. Appl. Phys. – 2000. - V.87 - P.5120.

21. Tokunaga, Y. Composite domain walls in a multiferroic perovskite ferrite / Y. Tokunaga, N. Furukawa, H. Sakai, et al. // *Nat. Mater.* - 2009. - V. 8. - P. 558.
22. Tokunaga, Y. Magnetic-Field-Induced Ferroelectric State in DyFeO<sub>3</sub> / Y. Tokunaga, S. Iguchi, T. Arima, Y. Tokura // *Phys. Rev. Lett.* - 2008. - V. 101. P. 097205.
23. Nakajima, T. Electric polarization induced by a proper helical magnetic ordering in a delafossite multiferroic  $CuFe_{1-x}Al_xO_2$  / T. Nakajima, S. Mitsuda, S. Kanetsuki, et al. // *Phys. Rev. B.* - 2008. - V. 77. - P. 052401.
24. Terada, N. Spiral-Spin-Driven Ferroelectricity in a Multiferroic Delafossite Ag-FeO<sub>2</sub> / N. Terada, D. D. Khalyavin, P. Manuel, et al. // *Phys. Rev. Lett.* - 2012. - V. 109. - P. 097203.
25. Seki, S. Spin-Driven Ferroelectricity in Triangular Lattice Antiferromagnets  $ACrO_2$  ( $A = Cu, Ag, Li, \text{ or } Na$ ) / S. Seki, Y. Onose, Y. Tokura // *Phys. Rev. Lett.* - 2008. - V. 101. - P. 067204.
26. Дзялошинский, И. Е. К вопросу о магнито-электрическом эффекте в антиферромагнетиках / И. Е. Дзялошинский // *ЖЭТФ.* - 1959. - Т. 37. - С. 881.
27. Mostovoy, M. Ferroelectricity in Spiral Magnets / M. Mostovoy // *Phys. Rev. Lett.* - 2006. - V. 96. - P. 067601.
28. Katsura, H. Spin Current and Magnetoelectric Effect in Noncollinear Magnets / H. Katsura, N. Nagaosa, A. V. Balatsky // *Phys. Rev. Lett.* - 2005. - V. 95. - P. 057205.
29. Sergienko, I.A. Dual nature of improper ferroelectricity in a magnetoelectric multiferroic / S. Picozzi, K. Yamauchi, B. Sanyal, I.A. Sergienko, E. Dagotto // *Physical review letters* - 2007. - V. 99 - P. 227201.
30. Cheong, S.W. Multiferroics: A magnetic twist for ferroelectricity / S.W. Cheong, M. Mostovoy // *Nature.* - 2007. - V. 6. - P. 13.
31. Pyatakov, A. P. Spin structures and domain walls in multiferroics / A. P. Pyatakov, A. K. Zvezdin, A. M. Vlasov et al. // *Ferroelectrics.* - 2012. - Vol. 438. - P. 79.

32. Yablonskii, D.A. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets / D.A. Yablonskii, A.N. Bogdanov // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1989. — V. 95. — P. 178.
33. Skyrme, T.H.R. A unified field theory of mesons and baryons / T.H.R. Skyrme // *Nuclear Physics.* — 1962. — V. 31. — P. 556.
34. Bogdanov, A.N. Magnetic structures and reorientation transitions in noncentrosymmetric uniaxial antiferromagnets / A. N. Bogdanov, U.K. Rössler, M. Wolf, K.-H. Müller // *Physical Review B.* — 2002. — V. — 66. - №. 21. — P. 214410.
35. Rössler, U.K. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals / U. K. Rössler, A.N. Bogdanov, C. Pfleiderer // *Nature.* — 2006. — V. 442. — №. 7104. — P. 797.
36. Diep, H.T. Skyrmion crystals: Dynamics and phase transition / H.T. Diep, S.El Hog, A. Bailly – Reyre // *AIP Advances.* — 2018. — V. 8. — P. 055707.
37. Kiselev, N.S. Chiral skyrmions in thin magnetic films: new objects for magnetic storage technologies? / N.S. Kiselev, A.N. Bogdanov, R. Schäfer, U.K. Rössler // *Journal of Physics D: Applied Physics.* — 2011. — V. 44. — №. 39. — P. 392001.
38. Sampaio, J. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures / J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart A. Thiaville and A. Fert // *Nature nanotechnology.* — 2013. — № 8. P. —839.
39. Brown, G. Micromagnetic simulations of thermally activated magnetization reversal of nanoscale magnets / G. Brown, M. A. Novotny, and Per Arne Rikvold // *J. Appl. Phys.* — 2000 . — V.87. — P.4792.
40. Parkin, S. S. Magnetic domain wall racetrack memory / S. S. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas // *Science.* — 2008. — V. 320. — P. 190.
41. Mühlbauer, S. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet / S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Boni // *Science* – 2009. - V.323. - P.915.
42. Onose, Y. Doping dependence of transport properties in  $Fe_{1-x}Co_xSi$  / Y. Onose, N. Takeshita, C. Terakura, H. Takagi, and Y. Tokura // *Phys. Rev. B* – 2005. - V.72 P.224431.

43. Schulz, T. Emergent electrodynamics of skyrmions in a chiral magnet / T. Schulz, R. Ritz, A. Bauer, M. Halder, M. Wagner, C. Franz, C. Pfleiderer, K. Everschor, M. Garst & A. Rosch // *Nature Physics* – 2012. - V.8 - P.301.
44. Streube, R. Magnetism in curved geometries / R. Streube, P. Fischer, F. Kronast, V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, Y. Gaididei, O.G. Schmidt, D. Makarov // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2016. - V.49. – P. 363001.
45. Albrecht, M. Magnetic multilayers on nanospheres / M. Albrecht, G. Hu, I. L. Guhr, T. C. Ulbrich, J. Boneberg, P. Leiderer, G. Schatz // *Nat. Mater.* – 2005. - V.4 - P.203.
46. nee Moser, J. K. Magnetoresistive effects in Co/Pd multilayers on self-assembled nanoparticles / J. K. nee Moser, V. Kunej, H.-F. Pernau, E. Scheer, and M. Albrecht // *J. Appl. Phys.* – 2010. - V.107. - P. 09C506.
47. Gusliencko, K.Y. Magnetic skyrmion low frequency dynamics in thin circular dots / K.Y. Gusliencko, Z.V. Gareeva // *J. Magn. Magn. Mat.* – 2017. - V.422 - P.176.
48. Parkin, S. S. Exchange-biased magnetic tunnel junctions and application to non-volatile magnetic random access memory / S. S. Parkin, K. P. Roche, M. G. Samant, P. M. Rice, R. B. Bayers, R. E. Scheuerlein, E. J. O. Sullivan, S. L. Brown, J. Buchigano, D. W. Abraham, Y. Lu, M. Rooks, P. L. Trouilloud, R. A. Wanner, and W. J. Gallagher // *J. Appl. Phys.* – 1999. - V.85. - P.5828.
49. Chapman, J. N. Direct observation of magnetization reversal processes in micron-sized elements of spin-valve material / J. N. Chapman, R. P. Aitchison, K. J. Kirk, S. McVitie, J. C. S. Kools, and M. F. Gillies // *J. Appl. Phys.* – 1998. - V.83. - P. 5321.
50. Heinze, S. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions / Heinze, S., Von Bergmann, K., Menzel, M., Brede, J., Kubetzka, A., Wiesendanger, R., Bihlmayer, G., Blügel, S. // *Nature Physics* – 2011. - V.7 - P.71.
51. Poienar, M. Structural and magnetic properties of  $CuCr_{1-x}Mg_xO_2$  by neutron powder diffraction / M. Poienar, F. Damay, C. Martin, et al. // *Phys. Rev. B.* -2009. - V. 79. - P. 014412.

52. Frontzek, M. Magnetic structure of  $CuCrO_2$ : a single crystal neutron diffraction study / M. Frontzek, G. Ehlers, A. Podlesnyak, et al. // J. Phys.: Condens. Matter. - 2012. - V. 24. - P. 016004.
53. Lee, M. Unusual hall effect anomaly in MnSi under pressure / Lee, M., Kang, W., Onose, Y., Tokura, Y., Ong, N.P. // Physical Review Letters – 2009. –V.102 - P.186601.
54. Bogdanov, A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals / Bogdanov, A., Hubert, A. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 1994. - V.138. - P.255.
55. Yu, X.Z. Skyrmion flow near room temperature in an ultralow current density / Yu, X.Z., Kanazawa, N., Zhang, W.Z., Nagai, T., Hara, T., Kimoto, K., Matsui, Y., Tokura, Y. // Nature Communications – 2012. - V.3. - P.988.
56. Zang, J. Dynamics of Skyrmion crystals in metallic thin films / Zang, J., Mostovoy, M., Han, J.H., Nagaosa, N. // Physical Review Letters – 2011. - V.107. - P.136804.
57. Petrova, O. Spin waves in a skyrmion crystal / Petrova, O., Tchernyshyov, O. // Physical Review B. – 2011. - V.84. - P.214433
58. Mochizuki, M. Spin-wave modes and their intense excitation effects in Skyrmion crystals / Mochizuki, M. // Physical Review Letters – 2012. - V.108. - P.017601.
59. Redhammer, G. J. Magnetic spin structure of pyroxene-type  $MnGeO_3$  / G. J. Redhammer, A. Senyshyn, G. Tippelt, G. Roth // J. Phys.: Condens. Matter. -2011. - V. 23. - P. 254202.
60. Drokina, T. Investigation of the magnetic structure in  $NaFeGe_2O_6$  using neutron powder diffraction / T. Drokina, G. Petrakovskii, L. Keller, J. Schefer // J. Phys.: Conf. Ser. - 2010. - V. 251. - P. 012016.
61. Johnson, R. D.  $Cu_3Nb_2O_8$ : A Multiferroic with Chiral Coupling to the Crystal Structure / R. D. Johnson, S. Nair, L. C. Chapon, et al. // Phys. Rev. Lett. - 2011. - V. 107. - P. 137205.

62. Kimura, K. Magnetolectric control of spin-chiral ferroelectric domains in a triangular lattice antiferromagnet / K. Kimura, H. Nakamura, K. Ohgushi, T. Kimura // *Phys. Rev. B.* - 2008. - V. 78. - P. 140401(R).
63. Hwang, E.H. Transport properties of diluted magnetic semiconductors: Dynamical mean-field theory and Boltzmann theory / Hwang, E.H., Das Sarma, S. // *Physical Review B* – 2005. - V.72. - P.035210.
64. Neubauer, A. Topological hall effect in the a phase of MnSi / Neubauer, A., Pfleiderer, C., Binz, B., Rosch, A., Ritz, R., Niklowitz, P.G., Böni, P. // *Physical Review Letters* – 2009. - V.102. - P.186602.
65. Binz, B. Chirality induced anomalous-Hall effect in helical spin crystals / Binz, B., Vishwanath, A. // *Physica B: Condensed Matter* – 2008. - V.403. - P.1336.
66. Lee, M. Unusual hall effect anomaly in MnSi under pressure / Lee, M., Kang, W., Onose, Y., Tokura, Y., Ong, N.P. // *Physical Review Letters* – 2009. – V.102. - P.186601.
67. Bogdanov, A. Stability of vortex-like structures in uniaxial ferromagnets / Bogdanov, A., Hubert, A. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 1999. - V.195. - P.182.
68. Kwon, H.Y. Effect of anisotropy and dipole interaction on long-range order magnetic structures generated by Dzyaloshinskii-Moriya interaction / Kwon, H.Y., Bu, K.M., Wu, Y.Z., Won, C. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2012. - V.324. - P.2171.
69. Ivanov, B.A. Magnetic vortices The microscopic analogs of magnetic bubbles / Ivanov, B.A., Stephanovich, V.A., Zhmudskii, A.A. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 1990. - V.88. - P.116.
70. Miao, B.F. Experimental realization of two-dimensional artificial skyrmion crystals at room temperature / Miao, B.F., Sun, L., Wu, Y.W., Tao, X.D., Xiong, X., Wen, Y., Cao, R.X., Ding, H.F. // *Physical Review B* – 2014. - V.90. - P.174411.
71. Münzer, W. Skyrmion lattice in the doped semiconductor  $Fe_{1-x}Co_xSi$  / W. Münzer, A. Neubauer, T. Adams, S. Mühlbauer, C. Franz, F. Jonietz, R. Georgii, P.

- Böni, B. Pedersen, M. Schmidt, A. Rosch, and C. Pfleiderer // *Phys. Rev. B.* –2010. –V. 81. – P. 041203.
72. Yu, X. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal / X. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. Park, J. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura // *Nature.* –2010. –V.465. – P.901.
73. Yu, X. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet *FeGe*, X. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui, and Y. Tokura // *Nat. Mater.* –2011. – V. 10. – P.106.
- 74.. Yang, H. Anatomy of Dzyaloshinskii-Moriya Interaction at Co/Pt Interfaces / H. Yang, A. Thiaville, S. Rohart, A. Fert, and M. Chshiev // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. - V.115. - P.267210.
75. Okunoa, T. MFM study of magnetic vortex cores in circular permalloy dots: Behavior in external field / T. Okunoa, K. Shigetoa, T. Onob, K. Mibua, and T. Shinjo // *J. Magn. Magn. Mater* – 2002. - V.240. - P.1.
76. Sapozhnikov M. V. Artificial dense lattice of magnetic bubbles/ M. V. Sapozhnikov, S.N. Vdovichev, O. L. Ermolaeva, N. S. Gusev, A. A. Fraerman, S. A. Gusev, Y.V. Petrov // *Applied Physics Letters.* – 2016. – T. 109. – №. 4. – P. 042406.
77. Kravchuk, V.P. Out-of-surface vortices in spherical shells / V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, R. Streubel, D. Makarov, O.G. Schmidt, Y. Gaididei // *Phys. Rev. B* - 2012. - V.85. - P.144433.
78. Ulbrich, T. C. Effect of magnetic coupling on the magnetization reversal in arrays of magnetic nanocaps / T. C. Ulbrich, C. Bran, D. Makarov, O. Hellwig, J. D. Risner-Jamtgaard, D. Yaney, H. Rohrmann, V. Neu, and M. Albrecht // *Phys. Rev. B.* – 2010. - V.81. - P.054421.
79. Günther, C. M. Microscopic reversal behavior of magnetically capped nanospheres / C. M. Günther, O. Hellwig, A. Menzel, B. Pfau, F. Radu, D. Makarov, M. Albrecht, A. Goncharov, T. Schrefl, W. F. Schlotter, R. Rick, J. Lüning, and S. Eisebitt // *Phys. Rev. B.* – 2010. - V.81. – P. 064411.
80. Mikuszeit, N. Quasiantiferromagnetic  $120^\circ$  Néel state in two-dimensional clusters of dipolequadrupole-interacting particles on a hexagonal lattice / N. Mikuszeit,

- L. Baraban, E. Y. Vedmedenko, A. Erbe, P. Leiderer, and R. Wiesendanger // *Phys. Rev. B*. -2009. - V.80. - P.014402.
81. Ulbrich, T. C. Magnetic properties of Co/Pt multilayers on self-assembled particle arrays / T.C. Ulbrich, D. Assmann, M. Albrecht // *Journal of Applied Physics*. – 2008. - V.104. - P.084311.
82. Amaladass, E. Nanospheres generate out-of-plane magnetization / E. Amaladass, B. Ludescher, G. Schütz, T. Tyliczszak, M.-S. Lee, and T. Eimüller // *Journal of Applied Physics*. – 2010. - V.107. - P.053911.
83. Taguchi, K. Ultrafast magnetic vortex core switching driven by topological inverse Faraday effect / K. Taguchi, J. Ohe, G. Tataru // *Physical Review Letters*. -2012.- V. 109.- №. 12.- P. 127204.
84. Rybakov, F.N. New Type of Stable Particlelike States in Chiral Magnets / F.N. Rybakov, A.B. Borisov, S. Blügel, N.S. Kiselev // *Physical Review Letters*. — 2015. — V. 115. — P. 117201.
85. Zheng, F. Experimental observation of chiral magnetic bobbars in B20-type *FeGe* / F. Zheng, F. N. Rybakov, A. B. Borisov, et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2018. — V. 13. — P. 451.
86. Boulle, O. Room-temperature chiral magnetic skyrmions in ultrathin magnetic nanostructures / O. Boulle, J. Vogel, H. Yang, S. Pizzini, D. de Souza Chaves, A. Locatelli, and all. // *Nature nanotechnology*. — 2016. — V.11. — № 5. — P. 449.
87. Litzius, K. Skyrmion Hall effect revealed by direct time-resolved X-ray microscopy / K. Litzius, I. Lemesh, B. Krüger, P. Bassirian, L. Caretta, K. Richter, F. Büttner, K. Sato, O. A. Tretiakov, J. Förster, R.M. Reeve, M. Weigand, I. Bykova, H. Stoll, G. Schütz, G. S. D. Beach & M. Kläui // *Nature Phys.* — 2017. — V.13. — P. 170.
88. Moreau-Luchaire, C. Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature / C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren, J. Sampaio, C. A. F. Vaz, N. Van Horne, P. Wohlhüter // *Nature nanotechnology*. — 2016. — V. 11. — №5. — P. 444.

89. Braun, H. B. Topological effects in nanomagnetism: from superparamagnetism to chiral quantum solitons / H. B. Braun // *Advances in Physics*. – 2012. – V. 61. – №. 1. – P. 1.
90. Tomasello, R. A strategy for the design of skyrmion racetrack memories / R. Tomasello, E. Martinez, R. Zivieri, L. Torres, M. Carpentieri, G. Finocchio // *Scientific reports*. – 2014. – V. 4. – P. 6784.
91. Seki, S. Observation of skyrmions in a multiferroic material / S. Seki, X.Z. Yu, S. Ishiwata, Y. Tokura // *Science (New York, N.Y.)*. – 2012. – V. 336. – №. 6078. – P. 198.
92. Seki, S. Magnetoelectric nature of skyrmions in a chiral magnetic insulator  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  / S. Seki, S. Ishiwata, Y. Tokura // *Physical Review B*. – 2012. – V. – 86. – №. 6. – P. 060403.
93. Liu, Y. Skyrmion dynamics in multiferroic insulators / Y. Liu, Y. Li, J. H. Han // *Physical Review B*. – 2013. – V. 87. – № 10. – P. 100402.
94. Yu, X. Magnetic stripes and skyrmions with helicity reversals / X. Yu, M. Mostovoy, Y. Tokunaga et al. // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. – 2012. – V. 109. – №. 23. – P. 8856.
95. Rosch, A. Extra twist in magnetic bubbles / A. Rosch // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2012. – V. 109. – №. 23. – P. 8793.
96. Romming, N. Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions / N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel et al. // *Science*. – 2013. – V. 341. – № 6146. – P. 636.
97. Pyatakov, A.P. Magnetically switched electric polarity of domain walls in iron garnet films / A.P. Pyatakov, D.A. Sechin, A.S. Sergeev et al. // *EPL (Europhysics Letters)*. – 2011. – V. 93. – № 1. – P. 17001.
98. Diep H. T. *Theory Of Magnetism: Application to Surface Physics* / H. T. Diep. – Singapore: World Scientific, 2014. – 661 p.
99. Сахненко, В. П. Обменная симметрия в описании магнитоэлектриков / В. П. Сахненко, Н. В. Тер-Оганесян // *Физика твердого тела*. – 2012. – Т. 54. – С. 294.

100. Lobzenko, I. P. Electric polarization of magnetic domain walls in magnetoelectrics / I. P. Lobzenko, P. P. Goncharov, N. V. Ter-Oganessian // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2015. - V. 27. - P. 246002.
101. Lin, S.Z. Magnetic vortex induced by nonmagnetic impurity in frustrated magnets / S. Z. Lin, S. Hayami, C.D. Batista, C.D. // *Phys. Rev. Lett.* –2016. –V. 116. –P. 187202.
102. Sharafullin, I. F. Spin Waves and Skyrmions in Magneto-Ferroelectric Superlattices: Theory and Simulation / I.F. Sharafullin, H. T. Diep // *Sciforum Electronic Conference Series.* –2019. –V. 5. – <https://doi.org/10.3390/ecea-5-06662>
103. Sharafullin, I. F. Magneto-ferroelectric interaction in superlattices: Monte Carlo study of phase transitions / I. F. Sharafullin, M. K. Kharrasov, H. T. Diep // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* –2019. – V.476. –P. 258.
104. Sharafullin, I. F. Modeling of magnetoelectric and surface properties in superlattices and nanofilms of multiferroics / I. F. Sharafullin, A. G. Nugumanov, A. R. Yuldasheva, A. R. Zharmukhametov, H. T. Diep // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* –2019. – V.475. – P. 453.
105. Харрасов, М. Х. Фазовые переходы и критические явления в пленках мультиферроиков с орторомбической магнитной структурой / М. Х. Харрасов, И. Р. Кызыргулов, И. Ф. Шарафуллин, А. Г. Нугуманов // *Известия Российской академии наук. Серия физическая.* . – 2016. – Т. 80. – № 6. – С. 766. – переводная версия - Kharrasov, M. K. Phase transitions and critical phenomena in multiferroic films with orthorhombic magnetic structure / M. K. Kharrasov, I. R. Kyzirgulov, I. F. Sharafullin, A. G. Nugumanov // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* –2016. – V. 80. – № 6. –P. 695.
106. Kharrasov, M. K. Influence of Mechanical Pressure and External Field on Dynamic Interactions in Segnetomagnetism / M. K. Kharrasov, I. R. Kyzirgulov, I.F. Sharafullin // *Solid State Phenomena.* –2010. –V. 1155. – №. 168. –P. 89.

107. Kalimullina, L. B. Structural bases for neurophysiological investigations of amygdaloid complex of the brain / L. B. Kalimullina, K. A. Kalkamanov, A. V. Akhmadeev, V. P. Zakharov, I. F. Sharafullin // Scientific reports. –V. 5. – P. 17052.
108. Kharrasov, M. K. The Correlations between Dynamic Interactions in Antiferromagnetic Multiferroics / M. K. Kharrasov, I. R. Kyzyrgulov, I. F. Sharafullin, A. G. Nugumanov // Solid State Phenomena. – 2015. – V. 233. – P. 383.
109. Vaz, C. A. F. Magnetoelectric Coupling Effects in Multiferroic Complex Oxide Composite Structures / C. A. F. Vaz, J. Hoffman, C. H. Ahn, R. Ramesh // Adv. Mater. - 2010. - V. 22. - P. 2900.
110. Okamoto, Y. Breathing Pyrochlore Lattice Realized in A-Site Ordered Spinel Oxides  $LiGaCr_4O_8$  and  $LiInCr_4O_8$  / Y. Okamoto, G. J. Nilsen, J. P. Attfield, Z. Hiroi // Phys. Rev. Lett. - 2013. - V. 110. - P. 097203.
111. Koshibae, W. Theory of skyrmions in bilayer systems / W. Koshibae and N. Nagaosa // Science Reports. – 2017. –V.7. – P.42645.
112. Martinez, J. Topological dynamics and current-induced motion in a skyrmion lattice / J. Martinez, M. Jalil // New J. Phys. –2016. – V.18. – P.033008.
113. Zverev, V. Magnetic and magnetothermal properties and the magnetic phase diagram of high purity single crystalline terbium along the easy magnetization direction /V. Zverev, A. Tishin, A. Chernyshov, Y. Mudryk, K. A. Gschneidner, V. K. Pecharsky, // J. Phys. Condens. Matter. – 2014. – V. 26. –P. 066001.
114. Zverev, V. Magnetic and magnetothermal properties, and the magnetic phase diagram of single-crystal holmium along the easy magnetization direction / V. Zverev, A. Tishin, Z. Min, Y. Mudryk, K. A. Gschneidner, V. K. Pecharsky, J. Phys. Condens. Matter. – 2015.– V. 27. – P. 146002.
115. Arima, T. Spin-Driven Ferroelectricity and Magneto-Electric Effects in Frustrated Magnetic Systems / T. Arima // J. Phys. Soc. Jpn. - 2011. - V. 80. - P. 052001.
116. Stishov, S.M. Magnetic phase transition in the itinerant helimagnet MnSi: Thermodynamic and transport properties / S.M. Stishov, A. E. Petrova, S. Khasanov, G.

- K. Panova, A. A. Shikov, J. C. Lashley, D. Wu, T. A. Lograsso // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 052405.
117. Harris, A. B. Order parameters and phase diagrams of multiferroics / A. B. Harris, A. Aharony, O. Entin-Wohlman // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2008. - V. 20. P. 434202.
118. Kenzelmann, M. Magnetic Inversion Symmetry Breaking and Ferroelectricity in TbMnO<sub>3</sub> / M. Kenzelmann, A. B. Harris, S. Jonas, et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. - V. 95. - P. 087206.
119. Moreau-Luchaire, C. Room-temperature current-induced generation and motion of sub-100 nm skyrmions. / Legrand, W., Maccariello, D., Reyren, N., Garcia, K., Moutafis, C., Moreau-Luchaire, C., Fert, A. // *Nano letters* – 2017. – V. 17. – P. 2703-2712.
120. Soumyanarayanan, A. Tunable room-temperature magnetic skyrmions in Ir/Fe/Co/Pt multilayers / A. Soumyanarayanan, M. Raju, A. G. Oyarce, A. K. Tan, M. Y. Im, A.P. Petrovic', P. Ho, K. Khoo, M. Tran, C. Gan, et al. // *Nat. Mater.* – 2017. – V.16. – P. 898.
121. Dupé, B. Engineering skyrmions in transition-metal multilayers for spintronics / B. Dupé, G. Bihlmayer, M. Böttcher, S. Blügel, S. Heinze // *Nat. Commun.* – 2016. – V.7. – P. 11779.
122. Müller, J. Edge instabilities and skyrmion creation in magnetic layers / J. Müller, A. Rosch, M. Garst, M. // *New J. Phys.* – 2016. – V.18. – P. 065006.
123. Rosch, A. Spintronics: Electric control of skyrmions / A. Rosch // *Nat. Nanotechnol.* – 2017. – V.12. – P. 103.
124. Shen, L. Spin torque nano-oscillators based on antiferromagnetic skyrmions / L. Shen, J. Xia, G. Zhao, X. Zhang, M. Ezawa, O. A. Tretiakov, X. Liu, Y. Zhou // *Appl. Phys. Lett.* – 2019. – V. 114. – P. 042402.
125. Fert, A. Skyrmions on the track / A. Fert, V. Cros, J. Sampaio // *Nat. Nanotechnol.* – 2013. – V. 8. – P. 152.

126. Bessarab, P. Stability and lifetime of antiferromagnetic skyrmions / P. Bessarab, D. Yudin, D. Gulevich, P. Wadley, M. Titov, O. A. Tretiakov // *Phys. Rev. B.* – 2019. – V. 99. – P. 140411.
127. Tomasello, R. Magnetic skyrmions: from fundamental to applications. / G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri, M. Kläui // *Journal of Physics D: Applied Physics* – 2016. – V.49. – P. 423001.
128. Zhang, X. Skyrmion dynamics in a frustrated ferromagnetic film and current-induced helicity locking-unlocking transition / X. Zhang, J. Xia, Y. Zhou, X. Liu, H. Zhang, M. Ezawa // *Nat. Commun.* – 2017. – V. 8. – P. 1717.
129. Leonov, A. Edge states and skyrmion dynamics in nanostripes of frustrated magnets / A. Leonov, M. Mostovoy // *Nat. Commun.* – 2017. – V. 8. – P.14394.
130. Hayami, S. Bubble and skyrmion crystals in frustrated magnets with easy-axis anisotropy / S. Hayami, S. Z. Lin, C. D. Batista // *Phys. Rev. B.* – 2016. – V. 93. – P. 184413.
131. Sharafullin, I. F. Skyrmion Crystal and Phase Transition in Magneto-Ferroelectric Superlattices: Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in a Frustrated J1-J2 Model / I.F. Sharafullin, H. T. Diep // *Symmetry.* –2020. –V.12. –№. 26. – P.1
132. Hayami, S. Vortices, skyrmions, and chirality waves in frustrated Mott insulators with a quenched periodic array of impurities // S. Hayami, S.Z. Lin, Y. Kamiya, C. D. Batista // *Phys. Rev. B.* –2016. – V. 94. – P. 174420.
133. Yuan, H. Skyrmions and multisublattice helical states in a frustrated chiral magnet / H. Yuan, O. Gomonay, M. Kläui // *Phys. Rev. B.* – 2017. – V.96. – P. 134415.
134. Rózsa, L. Skyrmions with attractive interactions in an ultrathin magnetic film / L. Rózsa, A. Deák, E. Simon, R. Yanes, L. Udvardi, L. Szunyogh, U. Nowak // *Phys. Rev. Lett.* – 2016. – V. 117. – P. 157205.
135. Rózsa, L. Formation and stability of metastable skyrmionic spin structures with various topologies in an ultrathin film / L. Rózsa, K. Palotás, A. Deák, E. Simon, R. Yanes, L. Udvardi, L. Szunyogh, U. Nowak // *Phys. Rev. B.* – 2017. – V. 95. – P. 094423.

136. Zheng, H. Multiferroic  $BaTiO_3 - CoFe_2O_4$  nanostructures / H. Zheng, J. Wang, S. Lofland, Z. Ma, L. Mohaddes-Ardabili, T. Zhao, L. Salamanca-Riba, S. Shinde, S. Ogale, F. Bai et al. // *Science*. – 2004. – V.303. – P. 661.
137. Nan, C.W. Magnetolectric effect in composites of piezoelectric and piezomagnetic phases / C.W. Nan // *Phys. Rev. B*. – 1994. – V. 50. – P. 6082.
138. Udalov, O. The Coulomb based magneto-electric coupling in multiferroic tunnel junctions and granular multiferroics / O. Udalov, I. Beloborodov // *AIP Adv.* – 2018. – V. 8. – P. 055810.
139. Ortiz-Álvarez, H. Monte Carlo simulation of charge mediated magnetoelectricity in multiferroic bilayers / H. Ortiz-Álvarez, C. Bedoya-Hincapié, E. Restrepo-Parra // *Phys. B. Condens. Matter*. – 2014. – V. 454. – P. 235.
140. Heidler, J. Manipulating magnetism in  $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$  via piezostain / J. Heidler, C. Piamonteze, R. V. Chopdekar, M. A. Uribe-Laverde, A. Alberca, M. Buzzi, A. Uldry, B. Delley, C. Bernhard, and F. Nolting // *Physical Review B*. – 2015. – V. 91. – №. 2. – P. 024406.
141. Niu, L. W. Emergent ferroelectricity in disordered tri-color multilayer structure comprised of ferromagnetic manganites / L.W. Niu, C. L. Chen, X. L. Dong, H. Xing, B. C. Luo, K. X. Jin // *Chinese Physics B*. – 2016. – V. 25. – №. 10. – P. 107701.
142. Takagi, H. Highly frustrated magnetism in spinels / H. Takagi, S. Niitaka // *Introduction to frustrated magnetism* / Ed. by C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila. Springer, - 2011.
143. Krimmel, A. Spin liquid versus spin solid in A-site spinels / A. Krimmel, V. Tsurkan, D. Sheptyakov, A. Loidl // *Physica B*. - 2006. - V. 378-380. - P. 583.
144. Kurmaev, E. Z. Electronic structure of  $FeCr_2S_4$  and  $Fe_{0.5}Cu_{0.5}Cr_2S_4$  / E. Z. Kurmaev, A. V. Postnikov, H. M. Palmer, et al. // *J. Phys.: Condens. Matter*. -2000. - V. 12. - P. 5411.
145. Wei, X.-K. Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials / X.-K. Wei, A. K. Tagantsev, A. Kvasov, et al. // *Nat. Commun.* - 2014. - V. 5. - P. 3031.

146. Salje, E. K. H. Domains within Domains and Walls within Walls: Evidence for Polar Domains in Cryogenic SrTiO<sub>3</sub> / E. K. H. Salje, O. Aktas, M. A. Carpenter, et al. // *Phys. Rev. Lett.* - 2013. - V. 111. - P. 247603.
147. Van Aert, S. Direct Observation of Ferrielectricity at Ferroelastic Domain Boundaries in CaTiO<sub>3</sub> by Electron Microscopy / S. Van Aert, S. Turner, R. Delville, et al. // *Adv. Mater.* - 2012. - V. 24. - P. 523.
148. Barone, P. Improper origin of polar displacements at CaTiO<sub>3</sub> and CaMnO<sub>3</sub> twin walls / P. Barone, D. Di Sante, S. Picozzi // *Phys. Rev. B.* - 2014. - V. 89.- P. 144104.
149. Wei, X.-K. Polarity of translation boundaries in antiferroelectric PbZrO<sub>3</sub> / X.-K. Wei, C.-L. Jia, K. Roleder, N. Setter // *Mater. Res. Bull.* - 2015. - V. 62. - P. 101.
150. Savero Torres, W. Switchable Spin-Current Source Controlled by Magnetic Domain Walls / W. Savero Torres, P. Laczkowski, V. D. Nguyen, et al. // *Nano Lett.* - 2014. - V. 14. - P. 4016.
151. Звездин, А. К. Неоднородное магнитоэлектрическое взаимодействие в мультиферроиках и вызванные им новые физические эффекты / А. К. Звездин, А. П. Пятаков // *УФН.* - 2009. - Т. 179. - С. 897.
152. Yu, H. W. Electric field control of ferroelectric domain structures in MnWO<sub>4</sub> / H. W. Yu, X. Li, M. F. Liu, et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2014. - V. 26. -P. 305901.
153. Ter-Oganessian, N. Active microrheology of networks composed of semiflexible polymers: Computer simulation of magnetic tweezers / N. Ter-Oganessian, B. Quinn, D. A. Pink, A. Boulbitch // *Phys. Rev. E.* - 2005. - V. 72. - P. 041510.
154. Sakhnenko, V. P. Phenomenological theory of phase transitions in multiferroic MnWO<sub>4</sub>: magnetoelectricity and modulated magnetic order / V. P. Sakhnenko, N. V. Ter-Oganessian // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2010. - V. 22. - P. 226002.
155. Popov, A. I. Origin of domain wall induced magnetoelectricity in rare-earth iron garnet single crystals and films / A. I. Popov, Z. V. Gareeva, A. K. Zvezdin, T.

T. Gareev, A. S. Sergeev, A. P. Pyatakov //Ferroelectrics. – 2017. – V. 509. – №. 1. – P. 32-39.

156. Sharafullin, I.F. Skyrmions in a Frustrated Model of Multiferroic Superlattices / I.F. Sharafullin, N.M. Nugaeva, M.K. Kharrasov // Letters on Materials. –2019. – V.9. – № 4. –P.499.

157. Fraerman, A.A. Skyrmion states in multilayer exchange coupled ferromagnetic nanostructures with distinct anisotropy directions / A.A.Fraerman, O.L.Ermolaeva, E.V.Skorohodov, N.S.Gusev, V.L.Mironov, S.N.Vdovichev, E.S.Demidov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.-2015. - V.393 - P.452.

158. Barmak, K. On the relationship of magnetocrystalline anisotropy and stoichiometry in epitaxial  $L1_0$  *CoPt* (001) and *FePt* (001) thin films / Barmak, K., Kim, J., Lewis, L.H., Coffey, K.R., Toney, M.F., Kellock, A.J., Thiele, J.-U. // Journal of Applied Physics. – 2005. - V.98. - P.033904.

159. Yu, M., Orientation and magnetic properties of *FePt* and *CoPt* films grown on *MgO* (110) singlecrystal substrate by electron-beam coevaporation / Yu, M., Ohguchi, H. Zambano, A., Takeuchi, I., Liu, J.P., Josell, D., Bendersky, L.A. // Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology. – 2007. - V.142. - P.139.

160. Suharyadi, E. Nanoscale patterning of *CrPt3* magnetic thin films by using ion beam irradiation / E. Suharyadi, D. Oshima, T. Kato, and S. Iwata // Results Phys – 2016. - V.6. - P.186.

161. Heidrich-Meisner, F. Universal emergence of the one-third plateau in the magnetization process of frustrated quantum spin chains / F. Heidrich-Meisner, I. A. Sergienko, A. E. Feiguin, E. R. Dagotto // Physical Review B. – 2007. – V. 7 . – № 6. –P. 064413.

162. Pyatakov, A. Magnetoelectricity goes local: From bulk multiferroic crystals to ferroelectricity localized on magnetic topological textures / A.P. Pyatakov // Phys. B Condens. Matter. – 2018. – V. 542. – P. 59.

163. Janssen, T. Dynamics of (anti) ferromagnetic/electric domain walls. / T. Janssen // Ferroelectrics. – 1994. – V. 162. – P. 265.

164. Janssen, T. Microscopic model for incommensurate crystal phases / T. Janssen, J. Tjon // *Physical Review B*. – 1982. – V. 25. – P. 3767.
165. Li, Q. Monte-Carlo study on phase transitions of ferroelectromagnets / Q. Li, X. Chen, X. Gao, J. M. Liu, Z. Liu // *Ferroelectrics*. – 2002. – V. 279. – P. 67.
166. Alberca, A. Phase separation enhanced magneto-electric coupling in  $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3/BaTiO_3$  ultra-thin films / A. Alberca, C. Munuera, J. Azpeitia, B. Kirby, N. Nemes, A. Perez-Muñoz, J. Tornos, F. Mompean, C. Leon, J. Santamaria et al. // *Science Reports*. – 2015. – V. 5. – P. 17926.
167. Karthik, T. A-Site Cation disorder and Size variance effects on the physical properties of multiferroic  $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$  Ceramics ( $RE = Gd^{3+}, Tb^{3+}, Dy^{3+}$ ) / T. Karthik, T. Durga Rao, A. Srinivas, S. Asthana // arXiv preprint. – 2012. – arXiv:1206.5606.
168. Garcia-Castro, A.C. Geometric ferroelectricity in fluoroperovskites / A.C. Garcia-Castro, N.A. Spaldin, A. Romero, E. Bousquet // *Physical Review B*. – 2014. – V. 89. – P. 104107.
169. Balents, L. Spin liquids in frustrated magnets / L. Balents // *Nature*. – 2010. – V. 464. – P. 199.
170. Pei, H. The Frustration-induced Ferroelectricity of a Manganite Tricolor Superlattice with Artificially Broken Symmetry / H. Pei, S. Guo, L. Ren, C. Chen, B. Luo, X. Dong, K. Jin, R. Ren, H.M. Zeeshan // *Science Reports*. – 2017. – V. 7. – P. 6201.
171. Pei, H. Enhanced magneto-electric effect in manganite tricolor superlattice with artificially broken symmetry / H. Pei, S. Guo, H. Yan, C. Chen, B. Luo, K. Jin, // *Chinese Physics B*. – 2018. – V. 27. – №. 9. – P. 097701.
172. Göbel, B. Antiferromagnetic skyrmion crystals: Generation, topological Hall, and topological spin Hall effect / B. Göbel, A. Mook, J. Henk, I. Mertig // *Physical Review B*. – 2017. – V. 96. – P. 060406.

173. Sharafullin, I. F. Dzyaloshinskii-Moriya interaction in magnetoferroelectric superlattices: Spin waves and skyrmions / I. F. Sharafullin, M. K. Kharrasov, H. T. Diep // *Physical Review B*. – (2019). – V. 99. – № 21. – P.214420.
174. Yadav, A. Observation of polar vortices in oxide superlattices / C. Nelson, S. Hsu, Z. Hong, J. Clarkson, C. Schlepütz, A. Damodaran, P. Shafer, E. Arenholz, L. Dedon, et al. // *Nature*. – 2016. – V. 530. – P. 198.
175. Гусев, С.А., О влиянии микрокристаллической структуры на магнитные свойства ферромагнитных пленок и структур на их основе / Гусев С.А., Татарский Д.А., Климов А.Ю., Рогов В.В., Скороходов Е.В., Сапожников М.В., Грибков Б.А., Нефедов И.М., Фраерман А.А. // *ФТТ* – 2013. - Т.55 - С.435.
176. Lohau, J. Quantitative determination of effective dipole and monopole moments of magnetic force microscopy tips / J. Lohau, S. Kirsch, A. Carl, G. Dumpich, and E. F. Wassermann // *J. Appl. Phys.* – 1999. - V.86. - P.3410.
177. Sheka, D.D. Equilibrium states of soft magnetic hemispherical shell / D.D. Sheka, V.P. Kravchuk, M.I. Sloika, Y. Gaididei // *SPIN* – 2013. - V.3. - P.1340003.
178. Natali, M. Correlated Magnetic Vortex Chains in Mesoscopic Cobalt Dot Arrays / M. Natali, I. L. Prejbeanu, A. Lebib, L. D. Buda, K. Ounadjela, and Y. Chen // *Phys. Rev. Lett.* - 2002 - V.88 - P.157203.
179. Shima, H. Pinning of magnetic vortices in microfabricated permalloy dot arrays / H. Shima, V. Novosad, Y. Otani, K. Fukamichi, N. Kikuchi, O. Kitakamai, and Y. Shimada // *J. Appl. Phys.* -2002. - V.92. - P.1473.
180. Косевич, А.М. Нелинейные коллективные возбуждения в легкоплоскостном магнетике / Косевич А.М., Воронов В.П., Манжос И.В. // *ЖЭТФ* – 1983. - Т.84. - С.148.
181. Mironov, V.L. Antivortex state in crosslike nanomagnets(Article) / Mironov, V.L., Ermolaeva, O.L., Gusev, S.A., Klimov, A.Yu., Rogov, V.V., Gribkov, B.A., Udalov, O.G., Fraerman, A.A., Marsh, R., Checkley, C., Shaikhaidarov, R., Petrashov, V.T. // *Physical Review B* - 2010 - V.81 - P.094436
182. Klaui, M. Vortex formation in narrow ferromagnetic rings / M. Klaui, C. A. F. Vaz, L. LopezDiaz, J. A. C. Bland // *J. Phys. Condens. Matter* - 2003 - V.15 - P.R985

183. Prosandeev, S. Control of Vortices by Homogeneous Fields in Asymmetric Ferroelectric and Ferromagnetic Rings / S. Prosandeev, I. Ponomareva, I. Kornev, and L. Bellaiche // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. - V.100. - P.047201.
184. Yakata, S. Control of vortex chirality in regular polygonal nanomagnets using in-plane magnetic field / S. Yakata, M. Miyata, S. Nonoguchi, H. Wada, and T. Kimura // *Appl. Phys. Lett.* -2010. - V.97. - P.222503.
185. Sagis, L.M.C. Dynamic properties of interfaces in soft matter: Experiments and theory / L.M.C. Sagis, // *Rev. Mod. Phys.* - 2011 - V.83 - P.1367.
186. Nelson, C. T. Phase Coexistence of Ferroelectric Vortices and Classical  $a_1/a_2$  Domains in  $PbTiO_3/SrTiO_3$  Superlattices / C. T. Nelson, Z. Hong, A. K. Yadav A. R. Damodaran, S. L. Hsu, J. D. Clarkson, R. Ramesh // *Microscopy and Microanalysis.* – 2018. – V. 24. – №. S1. – P. 1638.
187. Zhang, X. Skyrmion-skyrmion and skyrmion-edge repulsions in skyrmion-based racetrack memory. / X. Zhang, G. P. Zhao, H. Fangohr, J. P. Liu, W. X. Xia, J. Xia, F. J. Morvan // *Scientific reports* – 2015. – V.5. – P. 7643.
187. Zhang, X. Skyrmion dynamics in a frustrated ferromagnetic film and current-induced helicity locking-unlocking transition / X. Zhang, J. Xia, Y. Zhou, X. Liu, H. Zhang, M. Ezawa // *Nat. Commun.* – 2017. –V. 8. –P. 1717.
188. Lin, S.Z. Ginzburg-Landau theory for skyrmions in inversion-symmetric magnets with competing interactions / S. Z. Lin, S. Hayami // *Physical Review B* – 2016. - V.93. - P.064430.
189. Qian, F. New magnetic phase of the chiral skyrmion material  $Cu_2OSeO_3$  / F. Qian, L. J. Bannenberg, H. Wilhelm, G. Chaboussant, L.M. Debeer-Schmitt, M. P. Schmidt, A. Aqeel, T. T. M. Palstra, E. Brück, A. J. E. Lefering, C.Pappas, M. Mostovoy and A. O. Leonov // *Science advances.* – 2018. – V. 4. – №. 9. – P. 7323.
190. Lin, S.Z. AC current generation in chiral magnetic insulators and skyrmion motion induced by the spin Seebeck effect. / S.Z. Lin, C.D. Batista, C. Reichhardt, A. Saxena // *Physical review letters* – 2014. – V.112. – P. 187203.

191. Iwasaki, J. Universal current-velocity relation of skyrmion motion in chiral magnets / J. Iwasaki, M. Mochizuki, N. Nagaosa // *Nat. Commun.* – 2013. – V. 4. – P. 1463.
192. Talanov, V. M. Atomic order in the spinel structure - a group-theoretical analysis / V. M. Talanov, V. B. Shirokov // *Acta Cryst.* - 2014. - V. A70. - P. 49.
193. Iijima, Y. A new ferromagnetic thiospinel  $\text{CuCrZrS}_4$  with re-entrant spin-glass behaviour / Y. Iijima, Y. Kamei, N. Kobayashi, et al. // *Philos. Mag.* - 2003.- V. 83. - P. 2521.
194. Kalvius, G. M. Low temperature incommensurately modulated and noncollinear spin structure in  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$  / G. M. Kalvius, A. Krimmel, O. Hartmann, et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2010. - V. 22. - P. 052205.
195. Wheeler, E. M. Spin and orbital order in the vanadium spinel  $\text{MgV}_2\text{O}_4$  / E. M. Wheeler, B. Lake, A. T. M. Nazmul Islam, et al. // *Phys. Rev. B.* - 2010. - V. 82. - P. 140406(R).
196. Takagi, H. Epitaxially stabilized iridium spinel oxide without cations in the tetrahedral site. / H. Kuriyama, J. Matsuno, S. Niitaka, M. Uchida, D. Hashizume, A. Nakao, H. Takagi // *Applied Physics Letters* – 2010. – V. 96. – P. 182103.
197. Kesler, Ya. A.  $\text{CuCr}_2\text{S}_4$ -Based Quaternary Cation-Substituted Magnetic Phases / Ya. A. Kesler, E. G. Zhukov, D. S. Filimonov, et al. // *Inorg. Mater.* - 2005. V. 41. - P. 914.
198. Palmer, H. M. Structural, magnetic and electronic properties of  $\text{Fe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Cr}_2\text{S}_4$  / H. M. Palmer, C. Greaves // *J. Mater. Chem.* - 1999. - V. 9. - P. 637.
199. Aminov, T. G. Magnetic properties of  $\text{Cu}_{0.5}\text{Fe}_{0.5-x}\text{Ga}_x\text{Cr}_2\text{S}_4$  solid solutions / T. G. Aminov, D. I. Kirdyankin, G. G. Shabunina, V. M. Novotortsev // *Russ. J. Inorg. Chem.* - 2012. - V. 57. - P. 991.
200. Trolliard, G. Reinvestigation of Phase Transitions in  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$  by TEM. Part II: Second Order Orthorhombic to Tetragonal Phase Transition / G. Trolliard, V. Dorcet // *Chem. Mater.* - 2008. - V. 20. - P. 5074.

201. Suchanicz, J. On the phase transition in  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$  / J. Suchanicz, W. S. Ptak // *Ferroelectrics Lett.* - 1990. - V. 12. - P. 71.
202. Sakata, K. Ferroelectric and antiferroelectric properties of  $(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})\text{TiO}_3\text{-SrTiO}_3$  solid solution ceramics / K. Sakata, Y. Masuda // *Ferroelectrics.* - 1974. - V. 7. - P. 347.
203. El Hog, S. Skyrmions on 2D elastic surfaces with fixed boundary frame / S. El Hog, F. Kato, H. Koibuchi, H.T. Diep // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2020. – V. 498. – P. 166095.
204. Diep, H. T. Phase transition in frustrated magnetic thin film—physics at phase boundaries / H. T. Diep // *Entropy.* – 2019. – V. 21. – №. 2. – P. 175.
205. Koibuchi, H. Mathematical modeling of skyrmion shape deformation under uni-axial stresses / H. Koibuchi, V. Egorov, S. El Hog, F. Kato, H.T. Diep // *Journal of Physics: Conference Series.* – IOP Publishing. - 2019. – V. 1391. – №. 1. – P. 012013.
206. Харрасов, М. Х. Исследование динамического взаимодействия в сегнетомагнетиках с учетом влияния внешних полей диаграммным методом / М. Х. Харрасов, И. Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин // *Известия Российской академии наук. Серия физическая.* – 2010. – Т. 74. – №. 5. – С. 691. – переводная версия - Kharrasov, M. K. Study of the dynamic interaction in ferroelectromagnets with consideration of the influence of external fields by the diagram method / M. K. Kharrasov, I. R. Kyzyrgulov, I. F. Sharafullin // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* – 2010. – V.74. – № 5. – P. 656.
207. Сапожников, М. В. Магнитные скирмионы в пленках с модулированной толщиной / М. В. Сапожников, О.В. Ермолаева, Е. В. Скороходов, Н.С. Гусев, М.Н. Дроздов // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики.* –2018. –Т. 107. – № 6. –С. 378.
208. Муртазаев, А. К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / А.К. Муртазаев, И. К. Камилов, Х. К. Алиев // *Успехи физических наук.* –1999. – Т. 169. – № 7. – С. 773.

209. Прудников В В, Прудников П В, Мамонова М В Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН .– 2017. Т. 187. – С.817.
210. Sharafullin, I. F. Spin Waves and Skyrmions in Magneto-Ferroelectric Superlattices: Theory and Simulation / I.F. Sharafullin, H. T. Diep // Proceedings.- 2020.- V.-46. -№ 3. С.1.
211. Харрасов М.Х. Динамические обменные явления в сегнетомагнитных кристаллах / М.Х. Харрасов, И.Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин – // Уфа: РИЦ БашГУ, 2016. – 144 с.
212. Харрасов М.Х. Введение в физику конденсированного состояния: учебное пособие / М.Х. Харрасов, А.У. Абдуллин, И.Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин – // Уфа: РИЦ БашГУ , 2015. – С. 122.
213. Шарафуллин И.Ф. К вопросу о динамическом взаимодействии магнонов в мультиферроиках с симметрией / И. Ф . Шарафуллин, И.Р. Кызыргулов, Р.Ф. Тавлыкаев // Вестник Башкирского университета . – 2014. – Т. 19. – №2. – С. 390.
214. Харрасов М.Х. Воздействие механического напряжения и внешних полей на динамические свойства мультиферроика с орторомбической симметрией / М.Х. Харрасов, И.Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин // Известия РАН. Серия физическая. – 2013. – Т. 77. – № 10. – С. 1293. – переводная версия – Kharrasov, M. K. Impact of mechanical stresses and external fields on the dynamic properties of a multiferroic with orthorhombic symmetry / M. K. Kharrasov, I. R. Kuzurgulov, I. F. Sharafullin // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics . – 2013. – V.77. – № 10. – P. 1293.
215. Харрасов М.Х. Воздействие механического напряжения и внешних полей на динамические взаимодействия в сегнетомагнетике / М.Х. Харрасов, И.Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. – Т. 75. – № 8. – С. 1217. – переводная версия – Kharrasov, M. K. Effect of

mechanical stresses and external fields on dynamic interactions in a ferroelectromagnet / M. K. Kharrasov, I. R. Kyzыrgulov, I. F. Sharafullin // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics . – 2011. – V.75. – № 8. – P. 1217.

216. Шарафуллин, И. Ф. Влияние внешних полей на магнитоэлектрическую связь в сегнетомагнитных материалах / И.Ф. Шарафуллин // Вестник Башкирского университета. – 2010. – Т. 15. – № 1. – С. 10-14.

217. Кызыргулов, И.Р. Влияние внешнего электрического и магнитного полей на магнитоэлектрическое взаимодействие в сегнетомагнетиках / И.Р. Кызыргулов, И.Ф. Шарафуллин // Известия ВУЗов. Физика . – 2009. – Т, 52. – №2. – С.43.

218. Leufke, P.M. In situ magnetometry studies of magnetoelectric lsmo/pzt heterostructures // P.M. Leufke, R. Kruk, R.A. Brand, H. Hahn // Phys. Rev. B. –2013. – V. 87. – P. 094416.

219. Wang, W. Compensation behavior and magnetic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1/2, 1) ising double layer superlattice / W. Wang, F.-L. Xue, M.-Z. Wang // Physica B. –2017. –515. –P. 104.

220. Sharafullin, I.F. Elementary excitations in anisotropic nanofilms of multiferroics with competing interactions at the interface / I.F. Sharafullin //Letters on Materials. – 2020. – V. 10. – № 2. – P.50.

221. Sharafullin, I. F. Skyrmions and Phase Transitions in a Ferromagnetic/Ferroelectric Superlattices with Triangular Lattice / I. F. Sharafullin, H. T. Diep // IEEE Magnetic Letters – (2020) .- V. 11 (DOI: 10.1109/LMAG.2020.3009635

222. Sharafullin, I. F. Skyrmions and Spin Waves in Magneto-Ferroelectric Superlattices / I. F. Sharafullin, H. T. Diep // Entropy – (2020).- V. 22.-№ 8.- (<https://doi.org/10.3390/e22080862>)

223. Feraoun, A. Quantum monte carlo study of the electric properties of a ferroelectric superlattice / A. Feraoun, A. Zaim, M. Kerouad // Solid State Commun . –2016. – V. 248. –P. 88.

224. Sharafullin, I. Monte Carlo study of phase transitions and skyrmion crystal in magneto-antiferroelectric heterostructures with triangular lattice / I.F. Sharafullin,

A.G. Nugumanov, A. R. Yuldasheva, N. M. Nugaeva, M. Kh., Kharrasov, H.T. Diep  
// Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal - 2020. – V. 5. - № 2. - P.202 -  
2010.