

УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ  
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

*На правах рукописи*

**Нугуманов Айдар Гайсович**

**Топологически устойчивые спиновые структуры  
в наноразмерных мультиферроиках**

1.3.3. - Теоретическая физика

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, доцент

Шарафуллин Ильдус Фанисович

**Уфа – 2023 г.**

## Оглавление

<b>Введение .....</b>	<b>4</b>
Общая характеристика работы .....	4
Степень разработанности темы исследования .....	6
Цели и задачи диссертационной работы .....	12
Положения, выносимые на защиту .....	16
Объем и структура диссертации .....	19
<b>Глава 1. Особенности фазовых переходов и критических явлений в мультиферроидных сверхрешётках .....</b>	<b>23</b>
§ 1. Одноосный анизотропный мультиферроик типа перовскита .....	24
1.1. Модель .....	24
1.2. Методология численного моделирования фазовых переходов .....	25
1.3. Результаты моделирования .....	29
§2. Мультиферроидная сверхрешётка .....	33
2.1. Модель сверхрешётки .....	33
2.2 Результаты моделирования .....	37
Выводы к главе .....	46
<b>Глава 2. Скирмионы и фазовые переходы в ферромагнитно- ферроэлектрических сверхрешётках с треугольной симметрией .....</b>	<b>47</b>
§1. Модель .....	48
§2. Основное состояние сверхрешётки .....	51
§3. Основное состояние в присутствии внешнего магнитного поля .....	55
§4. Размерные эффекты .....	57
§5. Результаты моделирования и обсуждение результатов .....	59
Выводы к главе .....	62

<b>Глава 3. Поиск стабильных скирмионных решёток в основном состоянии в наноплёнке мультиферроика и изучение фазового параметрического пространства топологических зарядов с помощью искусственных нейронных сетей .....</b>	<b>63</b>
§1. Искусственная нейронная сеть .....	64
§2. Стабильность идеальной скирмионной решётки .....	67
2.1. Модель с дальнодействующим обменом.....	67
2.2. Результаты применения искусственной нейронной сети .....	70
§3. Фазовая диаграмма топологического заряда скирмионов в основном состоянии. ....	74
3.1. Упрощённая модель с параллельным ДМ-взаимодействием.....	74
3.2. Вычисление топологического заряда на треугольной решётке .....	76
3.3. Построение фазовой диаграммы топологического заряда в параметрическом пространстве $\mathbf{Jm}$ , $\mathbf{Jmf}$ . ....	80
Выводы к главе .....	84
<b>Заключение.....</b>	<b>86</b>
<b>Список литературы .....</b>	<b>88</b>

# Введение

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Одной из фундаментальных задач современной теоретической физики является исследование систем взаимодействующих многих частиц, частный случай которых представлен широким классом магнитоэлектрических кристаллических систем, проявляющих одновременно при определённых физических условиях различные типы дальнего порядка. Вследствие сильной корреляции между компонентами таких систем, они проявляют уникальные физические свойства, имеющие важное практическое значение для использования в составе элементной базы информационно-вычислительной техники, микроэлектронных устройств и приборов физического эксперимента нового поколения.

Значительные перспективы демонстрируют различные магнитоэлектрические композитные мультиферроики, создаваемые путём комбинирования чередующихся ферромагнитных и ферроэлектрических наноплёнок различной толщины.

Слоистая структура композитных мультиферроиков естественным образом обеспечивает нарушение пространственной симметрии кристалла, в связи с чем возможно проявление различных поверхностных эффектов, локализующихся на границах между слоями с различным упорядочением (также называемых интерфейсами). Такие эффекты, в зависимости от характера межслойного взаимодействия, могут приводить к возникновению нетривиальных топологических магнитных наноструктур, чувствительных к электромагнитным полям малой интенсивности, что позволяет применять такие материалы для создания ультраплотных спинтронных логических элементов и ячеек памяти.

Наличие и конфигурация таких топологических магнитных наноструктур зависит от соотношения интенсивности различных присутствующих видов взаимодействия и величин внешнего магнитного и

электрического полей. Таким образом, каждому набору указанных физических параметров модели можно поставить в соответствие определённую спиновую конфигурацию основного состояния композитного мультиферроика. С помощью математического аппарата искусственных нейронных сетей (ИНС) можно с большой степенью точности предсказывать желаемые стабильные конфигурации (например, магнитных нановихрей, также называемых скирмионами) и соответствующих параметров. Это позволяет значительно уменьшить временные и вычислительные затраты при исследовании многомерного параметрического пространства конфигураций и является полезным инструментом для дизайна новых композитных мультиферроиков.

Исследование физических свойств композитных мультиферроиков на основе моделирования спиновых и ферроэлектрических структур представляет актуальную задачу современной теоретической физики.

## Степень разработанности темы исследования

Важные результаты при исследовании физических явлений в магнитоупорядоченных системах были достигнуты во многом благодаря использованию моделей реальных систем, позволяющих последовательное применение известных математических методов статистической механики [1, 2, 3].

Модели спиновых систем различной размерности служили объектом многочисленных аналитических исследований проблем фазовых переходов [4, 5, 6], а также при установлении строгих математических результатов в статистической теории (см., например, [7]).

В последнее десятилетие наблюдается растущий интерес к магнитоэлектрическим свойствам композитных мультиферроиков [8, 9, 10, 11, 12, 13], также называемых свехрешётками, в связи с возможными приложениями в различных областях, таких как микроэлектроника, спиновый транспорт и оптоэлектроника [14, 15, 16, 17]. Особый интерес вызывают плёночные композитные мультиферроики, поскольку из-за малой толщины в них проявляется ряд удивительных квантовых и поверхностных эффектов, одним из примеров которых является гигантский магнитоэлектрический эффект [18, 19, 20, 21].

Для описания и объяснения магнитных свойств соединений редкоземельных и переходных металлов в работе [22] была предложена многоподрешёточная модель. Влияние толщины никелевого слоя на температуру фазового перехода ( $T_c$ ) изучалось в никель-ванадиевых свехрешётках Абидом и др. [23]. Э. Рестрепо-Парра и др. изучали эффект обменного смещения в бислоях  $La_{2/3}Ca_{1/3}MnO_3 / La_{1/3}Ca_{2/3}MnO_3$  [24]. Рязанов и др. исследовали зависимость температур фазового перехода типа «порядок-беспорядок» от толщины слоёв в бислоях  $Nb / Cu_{0.43}Ni_{0.57}$  [25]. Наблюдалось немонотонное поведение критической температуры перехода с увеличением толщины ферромагнитной прослойки. В литературе можно найти обширные данные по экспериментальным исследованиям влияния

толщин слоёв на критическое поведение сверхрешёток [26, 27, 28]. Теоретические исследования были в основном сконцентрированы на изучении свойств магнитных бислоёв. Фераун и др. использовали моделирование методом Монте-Карло для изучения фазовых диаграмм и магнитных свойств ферромагнитной сверхрешётки Изинга с чередующимися слоями (с амплитудами спинов 1 и 3/2 соответственно) [29]. Лю и др. исследовали магнитные свойства сверхрешетки с тремя случайно расположенными слоями (с амплитудами спинов 1/2, 1, 3/2) [30]. Вэй Ван и др. изучали компенсационное поведение и магнитные свойства ферромагнитной двойной сверхрешетки Изинга со смешанным спином (1/2, 1) с помощью моделирования методом Монте-Карло [31]. Обнаружено, что обменные параметры и толщины слоёв позволяют контролировать компенсационную температуру и температуру фазового перехода в двухслойной сверхрешётке. Используя некоторые разновидности модели Изинга, в работе [32] П. Сун и др. изучали двухслойную ферроэлектрическую плёнку с антиферроэлектрическим межслойным взаимодействием, подробно обсуждалось влияние поверхностного переходного слоя и антиферроэлектрического взаимодействия на диэлектрическую восприимчивость. Ядав и др. наблюдали сложную топологию электрической поляризации (ряды наномасштабных вихрей и антивихрей), используя конкуренцию между зарядовыми, орбитальными и решёточными степенями свободы в ферроэлектрических/параэлектрических сверхрешётках чередующихся слоёв титанатов свинца и стронция [33]. В короткопериодных сверхрешётках  $PbTiO_3 / SrTiO_3$  они наблюдали возникновение «несобственного» ферроэлектричества, из-за октаэдрических наклонов в стронциевом слое [34, 35, 36, 37]. Дж. К. Джокама и др. установили корреляции между распределением сверхтонкого поля вокруг атомов железа, магнитоэлектрическими свойствами и высоким магнитоэлектрическим коэффициентом в многослойных стопках  $BaTiO_3 / BiFeO_3$  с переменной толщиной одиночного слоя  $BiFeO_3$  вплоть до 5 нм [38]. Н. Джедреси и др.

изучали связь между деформацией и ферромагнитными / ферроэлектрическими свойствами в слоистых гетероструктурах  $CoFe_2O_4$  /  $BaTiO_3$  [39]. Жанг и др. продемонстрировали, что упорядоченная вставка слоёв  $BaTiO_3$  между слоями  $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$  эффективно усиливает ферромагнитный порядок и увеличивает температуру фазового перехода в сверхрешётки [40]. Используя расчеты функционала плотности из первых принципов, Дж. Ли исследовал динамику магнитоэлектрической связи в  $Fe / PbTiO_3 / Fe$  при изменении количества ферроэлектрических слоёв титаната [41]. Обнаружено, что изменение намагниченности  $Fe$  находится в линейной зависимости от внешнего деполяризирующего поля вблизи к интерфейсу сверхрешётки.

Среди типов магнитного упорядочения особый интерес представляют различные хиральные и вихревые структуры. Магнитные скирмионы – топологически защищённые вихревые нанообъекты – могут возникать в мультиферроиках в определенных диапазонах внешних полей и температур благодаря возможности сосуществования двух и более типов упорядочения [42, 43]. Они представляют огромный интерес как потенциальные носители информации в устройствах спинтроники [44, 45, 46]. Скирмионы обычно образуются под действием внешнего магнитного поля в нецентросимметричных наноплёнках или на интерфейсах гетероструктур и сверхрешёток с нарушенной поперечной симметрией [47, 48]. Куруманджи и др. наблюдали появление фазы решётки скирмионов блоховского типа в кристалле  $Gd_2PdSi_3$  центросимметричной треугольной решеткой [45]. Было показано, что магнитная фрустрация в этом материале стабилизирует скирмионную фазу, что было обнаружено при благодаря транспортным свойствам в магнитном поле. Другая группа [49] использовала вычисление функционала плотности из первых принципов при исследовании основного магнитного состояния и фазовых диаграмм антиферромагнетиков треугольной решёткой. Они показали, что без поля наиболее устойчивыми являются спиральные текстуры, и что в такой системе возможна

стабилизация скирмионной решётки при помощи внешнего магнитного поля. Другие недавние исследования [50, 51, 52] были сосредоточены на скирмионах, возникающих на интерфейсах магнитных кристаллов. Таким образом можно заключить, что на интерфейсах композитных материалов возможно естественное возникновение скирмионов, обладающих уникальной динамикой по сравнению со спиновыми структурами на интерфейсах однородных материалов [50, 51]. Применение скирмионов в спинтронике широко обсуждается, в частности Канг и др. в недавнем обзоре [52] отмечали их преимущества по сравнению с ранними магнитными устройствами, такими как магнитные пузыри. Среди наиболее важных применений скирмионов упомянем трековую память [53], логические элементы [54, 55], транзисторы [56, 57, 56] и искусственных синапсов и нейронных устройств со скирмионной базой [59, 60]. Роммингом и др. [61] впервые была продемонстрирована возможность управления скирмионами в бислое Pd / Fe на иридиевой подложке, что открывает возможность записывания и чтения индивидуальных скирмионов посредством спин-поляризованного туннельного тока. Пятаков с коллегами [62] установили возможность порождения скирмионов внешним электрическим полем за счет неоднородного магнитоэлектрического эффекта.

Многочисленные экспериментальные исследования выявили скирмионные структуры в металлических ферромагнетиках, допускающих магнитоэлектрическое взаимодействие вида Дзялошинского-Мории, например FeGe [63, 64], монослой Fe на различных подложках [65, 66, 67, 68] в узком диапазоне внешних параметров, магнитных полей и температуры. Уменьшение размеров скирмионов, повышение их устойчивости к комнатным температурам, а также снижение энергозатрат на управление скирмионами являются актуальными проблемами спинтроники. Одним из способов является использование искусственных антиферромагнетиков [69], в которых два ферромагнитных слоя связаны антиферромагнитно через

немагнитный слой: в таких системах согласно расчетам скирмионы меньше, стабильнее и требуют меньше энергии для манипулирования [70, 71].

Большие экспериментальные значения параметра магнитоэлектрического взаимодействия измерялись в разных материалах. Ферриани [72] определил константу ДМ-взаимодействия ближайших соседей  $|D|=4,6$  мэВ для монослоя Mn/W(110), которое доминирует в области малой обменной энергии и приводит к большому выигрышу энергии порядка 6,3 мэВ на атом Mn. Отметим, что расчеты из первых принципов [73] предсказывают значения параметра обменного взаимодействия  $|J|=1,4$  мэВ и анизотропию  $K=0,6$  мэВ. Авторы приводят условие  $D > 2\sqrt{J \cdot K}$ , из чего следует, что  $D$  должно быть больше 1,83 мэВ. В других магнитных материалах магнитные обменные взаимодействия составляют порядка нескольких десятков кельвинов:  $|J|=2$  мэВ для MnTe [74, 75],  $|J|=2,5$  мэВ для перовскитов  $\text{LaSrMn}_3\text{Mn}_4\text{TiO}$  [76]. Таким образом, экспериментально наблюдаемая константа сильного ДМ-взаимодействия  $|D|=4,6$  мэВ больше типичных значений параметра обменного взаимодействия.

Следует отметить, что численное моделирование мультиферроиков с несколькими видами взаимодействия даже при относительно небольшом количестве моделируемых частиц требует значительных вычислительных ресурсов. Значительный прогресс в развитии методов математического моделирования с использованием нейронных сетей в теории конденсированного состояния позволяет усовершенствовать и добиться серьезного ускорения методов исследования физических свойств материалов [77]. Например, разработка нейросети для представления квантовой волновой функции [78] послужила толчком в развитии моделирования систем многих взаимодействующих тел [79, 80, 81, 82]. Причиненко с соавт. [83] предложили новый метод глубокого машинного обучения для поиска параметров многослойной фотонной структуры по заданному оптическому спектру коэффициента отражения, позволяющий с высокой точностью

проектировать структуру материала по выходным характеристикам оптического сигнала, тем самым эффективно решая обратную задачу.

Использование нейронных сетей позволяет надеяться на успех в моделировании фрустрированных систем и наноплёнок, альтернативой которым являются статистические методы, требующие достаточно больших вычислительных ресурсов, хотя стоит отметить, что предпринимаются серьезные усилия по поиску альтернативных моделей обработки информации с высокой энергоэффективностью по аналогии с человеческим мозгом [82, 84]. Одной из возможных реализаций этого типа когнитивных вычислений являются «кумулятивные» вычислительные сети, построенные из нелинейных рекурсивно связанных резистивных магнитных элементов. В [85] авторами было высказано предположение, что сеть скирмионов, сформированных в фрустрированной магнитной пленке, способна обеспечить подходящую физическую реализацию приложений кумулятивной вычислительной сети.

Экспериментальные фазовые диаграммы ряда материалов указывают на значительные переходные области между различными фазами (в том числе скирмионами и парамагнитными), что ставит задачу точного определения фазовых границ между, к примеру, скирмионами и геликоидальной структурой. Нейросети успешно применяются для идентификации магнитных фаз магнитных гамильтонианов, являющихся примером сильнокоррелированных материалов [42, 43, 82, 85, 86, 87, 88]. В [82] подход машинного обучения применялся для распознавания и классификации сложных неколлинеарных магнитных структур в двумерных материалах и было показано, что стандартная нейросеть с прямой связью может эффективно использоваться для контролируемого обучения на конфигурациях топологически защищенных скирмионных и спиральных магнитных структур.

## Цели и задачи диссертационной работы

**Основной целью** диссертационной работы является исследование различных моделей магнитоэлектрического взаимодействия в тонких плёнках мультиферроиков и влияния геометрии изучаемых моделей, а также конкуренции различных типов взаимодействия на формирование и устойчивость топологических магнитных вихрей, с конечной целью разработки новых запоминающих устройств на базе троичной логики.

Для достижения этой цели в работе поставлены следующие **задачи**:

1. Исследовать характер фазовых переходов в модели одноосного мультиферроика типа перовскита с антиферромагнитным и антиферроэлектрическим типами взаимодействия при помощи методов Монте-Карло и гистограммной техники.
2. Изучить возникновения топологических магнитных вихревых структур методом градиентного спуска в ферромагнитно – ферроэлектрической и ферромагнитно – антиферроэлектрической сверхрешётках с треугольной кристаллической решёткой и исследование их температурной стабильности в присутствии и отсутствии внешнего магнитного поля методом Монте-Карло.
3. Исследовать зависимости стабильной магнитной конфигурации композитной мультиферроидной плёнки с плоскостной треугольной симметрией от параметров магнитного, ферроэлектрического, магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля при помощи аппарата искусственных нейронных сетей и метода градиентного спуска. Анализ параметрического «острова стабильности» решётки скирмионов.
4. Изучить зависимости амплитуды топологического заряда скирмионов в основном состоянии от параметров магнитного и магнитоэлектрического взаимодействия в форме Дзялошинского-Мория в композитной мультиферроидной плёнке с плоскостной треугольной симметрией и

построение подробной фазовой диаграммы топологического заряда с помощью нейронной сети.

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

1. В работе проведен численный анализ температурного поведения как кристаллических, так и композитных мультиферроиков, и изучены характеристики фазовых переходов в зависимости от величин параметров взаимодействия и внешних электрического и магнитного полей. Показано, что присутствие полей обеспечивает устойчивость упорядоченных фаз в магнитной и ферроэлектрической подсистемах в большом диапазоне температур, а также позволяет управлять критической температурой.

2. Исследовано формирование вихревых спиновых структур на интерфейсных слоях мультиферроидных сверхрешёток с фрустрированной треугольной решёткой и обнаружено возникновение скирмионов даже в отсутствии внешнего магнитного поля. Показано влияние внешнего магнитного поля и магнитоэлектрического взаимодействия типа Дзялошинского-Мория на конфигурацию вихревых спиновых структур в основном состоянии и определены условия температурной устойчивости скирмионов.

3. Впервые использован математический аппарат искусственных нейронных сетей для поиска устойчивых состояний в композитном мультиферроике. В параметрическом фазовом пространстве обнаружена большая область стабильности, в которой существует фаза скирмионной решётки в большом временном и температурном диапазоне.

4. Разработана методика вычисления топологического заряда на дискретной спиновой решётке и получена фазовая диаграмма топологических зарядов в основном состоянии композитного

мультиферроика в пространстве параметров обменного и магнитоэлектрического взаимодействий.

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

1. Изучены механизмы стабилизации магнитных скирмионов в сверхрешетках ферромагнетик / ферроэлектрик при помощи варьирования толщины слоёв и величины внешнего магнитного поля, что открывает предпосылки для новых решений устройств эффективной обработки и записи данных на основе скирмионов и топологических нелинейных наноразмерных структур.

2. Обнаруженные эффекты в мультиферроидных композитных наноплёнках позволяют предположить возможность дальнейшего уменьшения вышеупомянутых элементов компьютерной логики при сохранении управляемости не только при помощи внешних магнитных полей, но и электрического тока, решая таким образом проблему низкой энергоэффективности спинтронных устройств.

3. Высокая эффективность и запоминающая способность нейронных сетей объединена с высокой точностью метода градиентного спуска для поиска основных состояний системы многих взаимодействующих частиц, что позволит в дальнейшем более эффективный поиск материалов с требуемыми свойствами, такими как плотность записи и скорость чтения-записи информации.

Полученные результаты открывают широкие возможности для разработки и производства новейших типов запоминающих устройств со сверхплотной записью и низкой энергозатратностью.

**Методология и методы исследования.** Основу методологического подхода в исследовании топологических структур кристаллоупорядоченных систем, представляющих собой сильнокоррелированные спиновые и ферроэлектрические подсистемы, составляет использование модельных

гамильтонианов, широко апробированных в различных задачах статистической механики. Для математического моделирования фазовых переходов и критических явлений в диссертации использованы компьютерные методы Монте-Карло, которые являются весьма эффективным инструментом и находят достаточно широкое применение в компьютерной физике. Особо ценным является тот факт, что результаты Монте-Карло моделирования фазовых переходов в объемных структурах согласуются с экспериментальными данными. Среди других использованных статистических подходов – гистограммный метод, позволяющий аппроксимировать энергетический спектр моделей для прямого вычисления термодинамических характеристик.

Для вычисления основного состояния был использован метод градиентного спуска, оптимизированный с помощью вспомогательных искусственных нейронных сетей.

Разработан метод вычисления характеристик топологического заряда на дискретной спиновой решётке.

## Положения, выносимые на защиту

1. Построена диаграмма зависимости топологического заряда скирмионов от интенсивностей основных параметров взаимодействия системы, в том числе обмена и взаимодействия Дзялошинского-Мории, и исследован вопрос о стабильности топологически защищенных структур по отношению к материальным параметрам.
2. Построены фазовые диаграммы в наноразмерных мультиферроиках с кубической симметрией, свидетельствующие о тесной взаимосвязи магнитных и ферроэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу значения температур переходов внутри пленок и на интерфейсе. Установлены критические значения параметров взаимодействия, при которых в системе наблюдается изменение типа фазового перехода.
3. Показано, что скирмионы в основном состоянии в магнитоэлектрических сверхрешетках с треугольной симметрией формируются в области значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} \in [-1.0, -0.75]$  в отсутствии внешнего магнитного поля и распределяются в трехмерном пространстве ферромагнитного слоя. В магнитоэлектрических сверхрешетках с кубической симметрией такого эффекта не наблюдается. Толщина ферроэлектрического слоя не влияет на устойчивость скирмионной структуры и напротив, толщина магнитной пленки определяет стабильность скирмионной структуры: скирмионы формируются только для диапазона от четырех до шести магнитных слоев в отсутствии внешнего магнитного поля.
4. Предложен алгоритм на основе искусственных нейросетей, который обеспечивает быстрый поиск определенных устойчивых состояний в параметрическом пространстве, при этом каждый новый элемент обучающих данных повышает точность предсказания ИНС. Определены диапазоны значений параметров, которые соответствуют стабильным основным состояниям со скирмионной решеткой.

5. В двуслойной пленке антиферромагнетик/ферроэлектрик с треугольной симметрией обнаружены четыре четко различимые фазы, две из которых обладают высокими значениями топологического заряда, но при этом отличаются топологией скирмионов. Границы скирмионных фаз являются чётко определёнными, при пересечении которых топологический заряд скирмионов претерпевает скачкообразное изменение. Внутри фаз происходит плавное изменение основного состояния.

**Степень достоверности.** Исследования, проведённые в диссертации, основаны на различных статистических методах, таких как методы моделирования Монте-Карло, метод энергетических гистограмм и методы стохастического и градиентного спуска. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими результатами, получаемыми различными квантово-статистическими методами для изучаемых систем многих взаимодействующих частиц.

**Апробация работы.** Все основные результаты работы обсуждались на семинарах Физико-технического института и на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет». Материалы диссертационной работы были представлены на 20 российских и международных научных конференциях, в том числе: Euro-Asian symposium “Trends in magnetism”, 2016 (Красноярск), 2019 (Екатеринбург); Moscow International Symposium on Magnetism – 2014, 2017 (Москва); Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (2015 гг.), Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-19), (Ростов-на-Дону, 2015 г.); Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированной среде», Челябинск, Россия, 24-29 августа 2015 г, Международная конференция Multiferroics-V, 2015, Туапсе, Joint European Magnetic Symposium “JEMS-2018” (3 – 5 september 2018, Mainz, Germany), IEEE Advances in Magnetism

2020 - Moena (Trento), Italy, XXVI Международный Симпозиум «Нанозифика и Нанозлектроника», 14-17 марта 2022, Нижний Новгород и других.

**Личный вклад автора.** Основные результаты диссертации опубликованы в 8 статьях в ведущих российских и зарубежных физических журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science (WoS), Scopus, РИНЦ (RSCI), ВАК, а помимо этого, по материалам диссертации опубликованы более 20 работ в трудах конференций и рабочих совещаний. Личный вклад автора являлся определяющим при проведении численных исследований, разработке теоретических моделей, анализе полученных результатов и предоставлении их в печати. Непосредственное создание кода программ Монте-Карло моделирования и метода градиентного спуска, анализ и интерпретация результатов моделирования. Самостоятельное изучение математического аппарата и программирование искусственных нейронных сетей для оптимизации метода градиентного спуска. Постановка задач и проведение основного массива статистических модельных вычислений, анализ их результатов. При этом необходимо отметить, что теоретическое исследование основного состояния в объёмных мультиферроиках и сверхрешетках с межслойным магнитоэлектрическим взаимодействием проведено совместно с И.Ф. Шарафуллиным, М.Х. Харрасовым и Х.Т. Диепом в работах [96, 104, 114]. Автором была проведена значительная работа над текстом статей, а также представление их в архив и редакции журналов и переписка с редакторами и рецензентами.

## Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка публикаций автора и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 99 страниц. Диссертация содержит 42 рисунка. Список литературы включает 122 наименования.

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 численному исследованию температурной стабильности упорядоченных конфигураций в магнитной и ферроэлектрической подсистемах, а также фазовых переходов в мультиферроиках двух типов: перовскитов и сверхрешёток составленных из чередующихся магнитных и ферроэлектрических слоёв различной толщины.

Для магнитной и ферроэлектрической подсистем перовскитов выберем гамильтонианы в виде:

$$\mathcal{H}_m = - \sum_{(i,j)} \{J_{ij}(S_{ix}S_{iy} + S_{jx}S_{jy}) + \vec{H}\vec{S}_i\}$$
$$\mathcal{H}_f = - \int d\vec{x} \{ \chi_{ij}^{\alpha\beta} \vec{P}_i^\alpha \vec{P}_j^\beta + a_{ijm}^\alpha \vec{P}_i^\alpha \vec{S}_j \vec{S}_m - 2\vec{E}(\vec{P}^1 + \vec{P}^2) \}$$

Результаты моделирования показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную для магнитной подсистемы и соответствующий переход из антиферроэлектрической фазы в таких кристаллах являются переходами второго рода.

При моделировании сверхрешёточных мультиферроиков с кубической симметрией предполагалось, что магнитоэлектрическое взаимодействие эффективно только на прилегающих границах магнитных и ферроэлектрических слоёв:

$$H_{mf} = - \sum_{i,j,k} J_{ijk}^{mf} [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \cdot \vec{P}_k$$

Было обнаружено, что при значениях магнитоэлектрического параметра ниже определённой интенсивности, температуры фазовых переходов в подсистемах расходятся а при значениях выше критического фазовый переход в системе приобретает характер первого рода.

**Во второй главе** исследуется образование скирмионов и скирмионных решёток в основном состоянии ферромагнитно-ферроэлектрической мультиферроидной сверхрешетке с треугольной симметрией и перпендикулярным магнитоэлектрическим взаимодействием типа Дзялошинского-Мория на границах магнитных и ферроэлектрических слоёв, а также фазовые переходы в этих системах и стабильность скирмионов в зависимости от величины магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля.

Для изучения стабильности спиновых структур используется магнитный параметр порядка, вычисляемый по формуле:

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

Было обнаружено, что в отсутствии магнитного поля при превышении абсолютной величины магнитоэлектрического взаимодействия некоторого критического значения в основном состоянии возникают отдельные крупные скирмионы, а при дальнейшем увеличении их количество возрастает на интерфейсном слое и при этом их радиус уменьшается. Такое поведение не наблюдалось при моделировании мультиферроидной сверхрешётки и обусловлено естественной фрустрацией, создаваемой треугольной симметрией слоёв. Гигантские значения магнитоэлектрического параметра приводят к устранению фазового перехода на интерфейсном магнитном слое.

Было показано, что присутствие слабого магнитного поля играет роль стабилизирующего фактора для образующейся идеальной скирмионной решётки. При превышении критического значения поля спиновая система ожидаемо переходит в ферромагнитную фазу.

**В третьей главе** предлагается обобщённый подход к исследованию различных упорядоченных конфигураций композитной мультиферроидной плёнки с треугольной симметрией, состоящей из внутреннего магнитного слоя и двух внешних ферроэлектрических слоёв, в зависимости от параметров взаимодействия и величины внешнего магнитного поля при помощи аппарата искусственных нейронных сетей. В частности, нейросети применяются для хранения известных стабильных состояний плёнки и соответствующих параметров, а также для предсказания конфигурации для неизвестных комбинаций параметров и дальнейшего применения в качестве первого приближения для вычисления основного состояния методом градиентного спуска.

Было исследовано 2 случая:

1) Фазовое пространство 8 параметров для модели с перпендикулярным магнитоэлектрическим взаимодействием Дзялошинского-Мория, а именно  $\{J_m^1, J_m^2, J_m^3, J_f, J_{mf}, H^x, H^y, H^z\}$ , где  $J_m^1, J_m^2, J_m^3$  – параметры обменного взаимодействия ближайших, вторых ближайших и третьих ближайших соседей,  $J_f, J_{mf}$  – параметры диполь-дипольного и магнитоэлектрического ДМ-взаимодействия,  $H^x, H^y, H^z$  – компоненты внешнего магнитного поля.

2) Фазовая плоскость с обменным и параллельным магнитоэлектрическим ДМ-взаимодействием в качестве координат. В модели параллельного магнитоэлектрического взаимодействия вектор Дзялошинского-Мория предположен лежащим в плоскости плёнки и равный по амплитуде произведению параметра взаимодействия и амплитуды ближайшего диполя, а именно  $\vec{D}_{i,k} = J^{mf} P_i^k (\vec{e}_x, \vec{e}_y, 0)$ .

В первом случае в восьмимерном фазовом пространстве был обнаружен «остров стабильности», в котором идеальная скирмионная решётка и её незначительные вариации являются локальным минимумом энергии системы.

Во втором случае проведён детальный анализ основных состояний в плоскости  $-1 \leq J^m \leq 1, -1 \leq J^{mf} \leq 1$  с шагом 0.1 и построена фазовая диаграмма, отражающая фазы с различной абсолютной величиной топологического заряда магнитного слоя. В частности, было обнаружено четыре чётко различимые фазы, две из которых содержат скирмионы с различной топологией (хиральные и нехиральные).

**В Заключении** сформулированы основные результаты диссертации.

## **Глава 1. Особенности фазовых переходов и критических явлений в мультиферроидных сверхрешётках**

Данная глава посвящена исследованию фазовых переходов и критических явлений в материалах с сильно коррелирующими магнитной и ферроэлектрической подсистемами, а также теоретические исследования влияния внешних полей (постоянных и переменных) на динамику фазовых переходов в плёнках мультиферроика толщиной в несколько атомарных слоев семейства перовскита с сильной плоскостной анизотропией. Также эта глава посвящена изучению фазовых переходов в мультиферроидной сверхрешётке с двумя параметрами порядка с помощью моделирования методом Монте-Карло. Подробно рассмотрено влияние магнитоэлектрической связи между ферроэлектрическим и ферромагнитным слоями системы на критическую температуру, параметры порядка, восприимчивость, внутреннюю энергию, поверхностную намагниченность системы. Показана зависимость намагниченности слоев от температуры при различных параметрах взаимодействия и поля.

Основные результаты первой главы диссертации опубликованы в статьях и трудах конференций [96, 104, 105, 114].

## § 1. Одноосный анизотропный мультиферроик типа перовскита

### 1.1. Модель

Рассмотрим одноосный анизотропный мультиферроик со структурой перовскита (такие как  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,  $\text{BiFeO}_3$  и т.д.), состоящий из двух эквивалентных магнитных и ферроэлектрических подрешеток. Гамильтониан магнитной подсистемы выбирается в виде модели с лёгкой плоскостью с учетом влияния внешнего магнитного поля:

$$\mathcal{H}_m = - \sum_{(i,j)} \{J_{ij}(S_{ix}S_{iy} + S_{jx}S_{jy}) + \vec{H}\vec{S}_i\} \quad (1.1)$$

Здесь принято, что  $J_{ij}$  – параметр обменного взаимодействия,  $\vec{S}_i$  – гейзенберговский спин,  $\vec{H}$  – внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно  $XU$ -плоскости.

Для ферроэлектрической подсистемы гамильтониан выбираем в следующем виде:

$$\mathcal{H}_f = - \sum_{(i,j,m)} \{ \chi_{ij}^{\alpha\beta} \vec{P}_i^\alpha \vec{P}_j^\beta + a_{ijm}^\alpha \vec{P}_i^\alpha \vec{S}_j \vec{S}_m + 2\vec{E}(\vec{P}_i^1 + \vec{P}_i^2) \} \quad (1.2)$$

Здесь учитывается магнитоэлектрический эффект и влияние внешнего электрического поля. Здесь  $\vec{P}_i^\alpha$  – отклонение вектора поляризации  $\alpha$ -той подрешетки от его равновесного значения (электрический диполь),  $\chi_{ij}^{\alpha\beta}$  – тензор обратной диэлектрической восприимчивости,  $a_{ijm}^\alpha$  – тензор линейного магнитоэлектрического взаимодействия,  $\vec{E}$  – напряженность постоянного внешнего электрического поля. Будем считать, что наша решетка состоит из двумерных орторомбических слоев, сложенных по ортогональной оси, и исследуем данную систему с помощью метода Монте-Карло.

## 1.2. Методология численного моделирования фазовых переходов

Для моделирования термодинамических свойств мультиферроиков мы будем использовать два высокоэффективных метода Монте-Карло – алгоритм Метрополиса и гистограммную технику [50, 89].

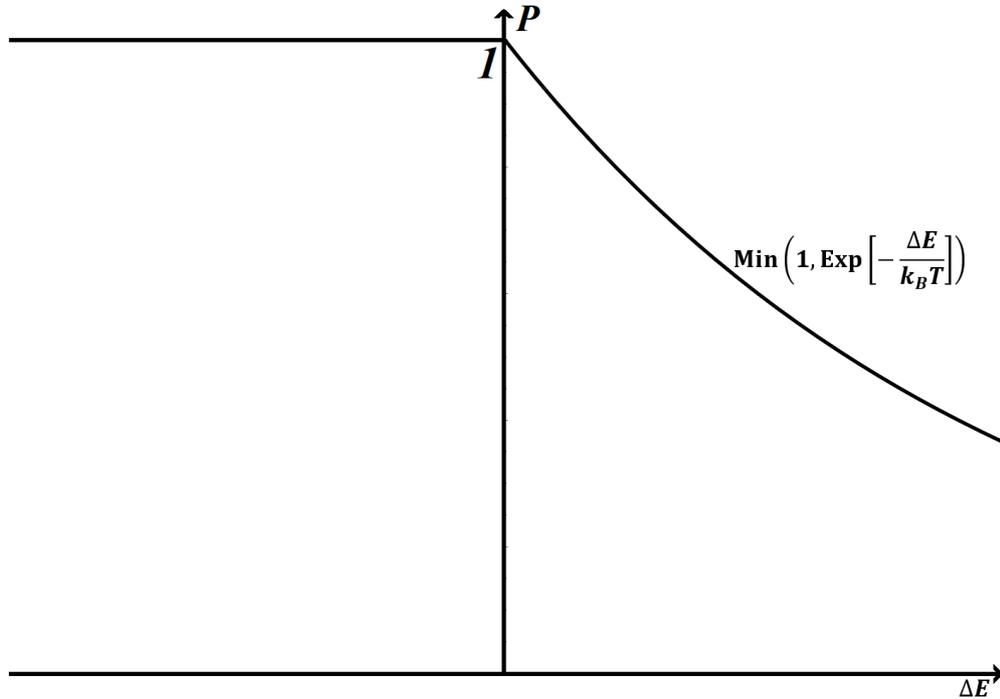


Рис. 1.1. Функция вероятности в алгоритме Метрополиса.

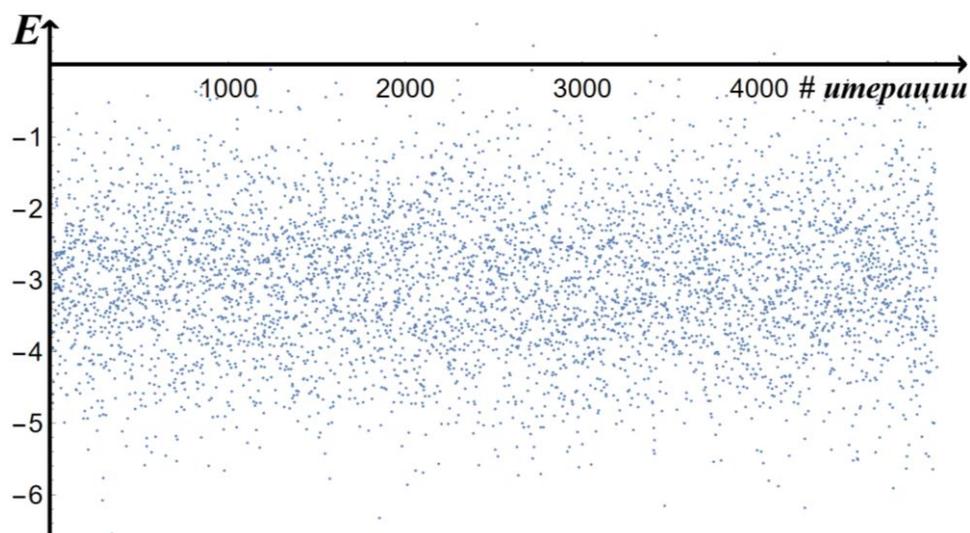
Алгоритм Метрополиса удобен в применении для моделирования систем с точно известным гамильтонианом, определяющим энергию системы. Суть алгоритма заключается в последовательном переборе значений переменных (таких как спины и диполи) и в вероятностном присвоении переменным одного из этих значений. Эта вероятность определяется формулой:

$$P(\Delta E, T) = \text{Min}\left(1, \text{Exp}\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right]\right) \quad (1.2)$$

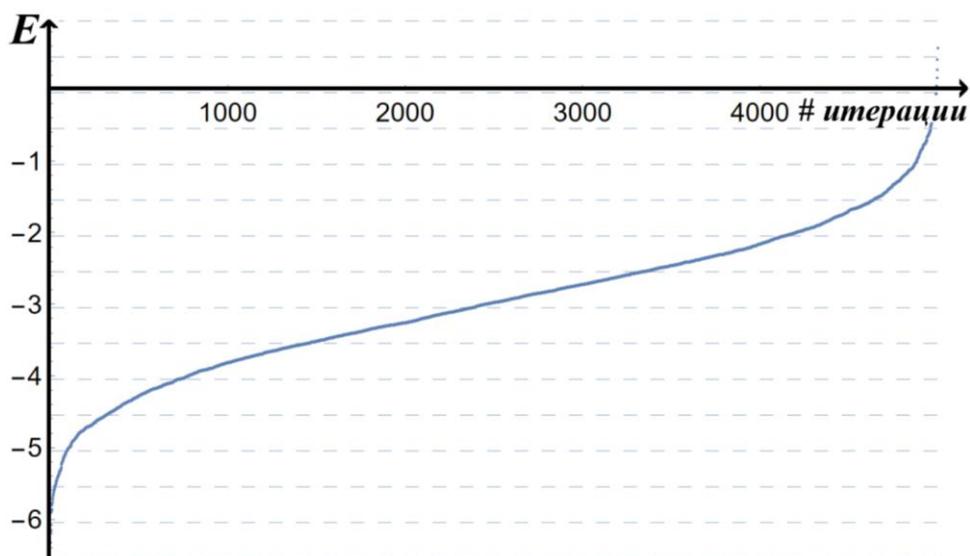
Здесь  $\Delta E = E_{New} - E_{Old}$ ,  $E_{New}$  и  $E_{Old}$  – величины энергии, соответствующие старому и новому значению переменной. Следует обратить внимание на асимметричность этой функции относительно знака  $\Delta E$ :  $\Delta E < 0$  при  $E_{New} < E_{Old}$  и вероятность равна единице, так как новое значение переменной энергетически выгоднее; при положительном  $\Delta E$  новое значение

переменной энергетически невыгодно и принимается с Больцмановской вероятностью в зависимости от температуры  $T$  (рис. 1.1.).

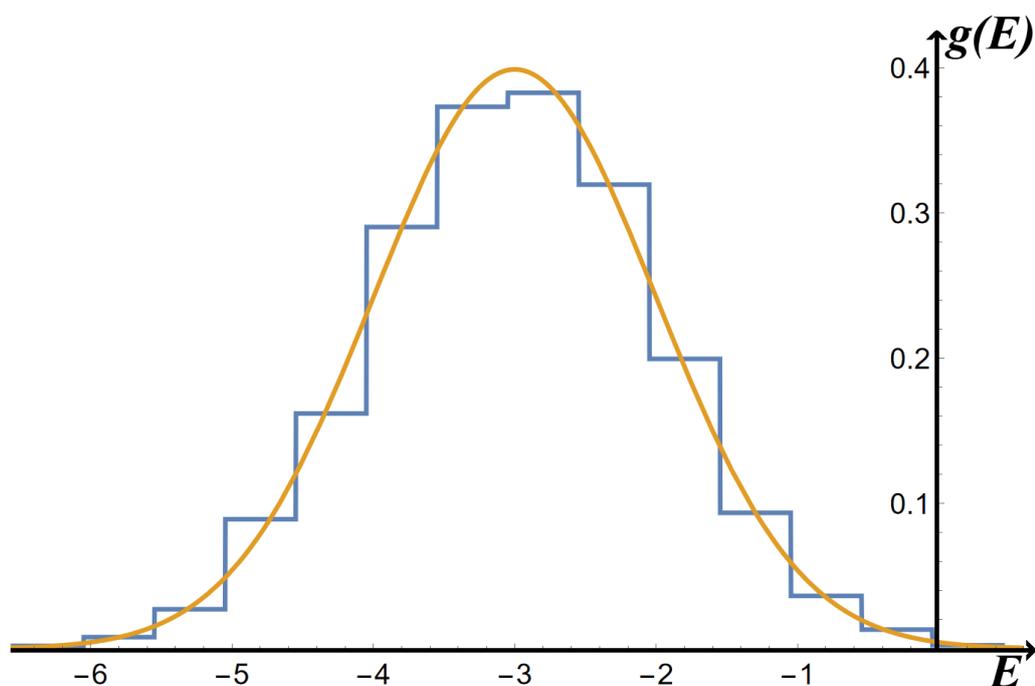
Метод гистограммной техники в статистической физике сводится к аппроксимации энергетического спектра исследуемой модели путём сэмплирования. Этот метод хорошо сочетается с алгоритмом Метрополиса, так как при каждой итерации выбирается некоторый экземпляр статистического ансамбля. Для получения гистограммы все известные значения энергии сортируются по возрастанию и разбиваются на группы  $\{E_i, E_{i+1}\}$  с некоторым шагом  $\delta E = E_{i+1} - E_i$ . На рис. 1.2. представлен алгоритм построения гистограммы по заданному ансамблю:



а)



б)



в)

Рис. 1.2. Алгоритм построения энергетической гистограммы. а) ансамбль известных значений, б) сортированный ансамбль известных значений, в) полученная (приведённая) гистограмма с шагом  $\delta E = 0.5$  (синяя кривая) и исходное распределение ансамбля (оранжевая кривая).

При достаточном количестве итераций ( $\sim 10^5$  [50]) и достаточно малом значении  $\delta E$  плотность состояний  $g(E)$  стремится к исходному статистическому распределению (с точностью до масштабирующего множителя).

Компьютерные вычисления проводились для наноплёнки мультиферроика с линейными размерами  $N = 100 \times 100 \times 4$ . На систему накладываются периодические граничные условия в плоскости пленки. Для того чтобы система “находилась” в состоянии термодинамического равновесия мы отбрасываем первые 100000 итераций, а усреднение термодинамических величин проводим в течение 400000 итераций. Параметры порядка для магнитной и ферроэлектрической подсистем определяется с помощью выражений:

$$\vec{M}_\alpha = \frac{C}{N} \sum_i (-1)^n \vec{S}_i \quad (1.3)$$

$$\vec{p}_\alpha = \frac{C}{N} \sum_i (-1)^n \vec{P}_i \quad (1.4)$$

$$M = \frac{1}{2} \sqrt{(\vec{M}_1 + \vec{M}_2 - \vec{M}_3 - \vec{M}_4)^2 + (\vec{M}_1 + \vec{M}_4 - \vec{M}_2 - \vec{M}_3)^2} \quad (1.5)$$

$$p = \frac{1}{2} \sqrt{(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4)^2 + (\vec{p}_1 + \vec{p}_4 - \vec{p}_2 - \vec{p}_3)^2} \quad (1.6)$$

Здесь принято, что  $n$  – номер слоя решетки. Вычисления средних термодинамических величин, таких как энергия  $E$ , теплоемкость и восприимчивость  $\chi$  проводились по формулам

$$\langle E^n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E E^n g(E) \exp(-E/k_B T) \quad (1.7)$$

$$\langle M^n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E M(E)^n g(E) \exp(-E/k_B T) \quad (1.8)$$

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \quad (1.9)$$

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T} \quad (1.10)$$

$$Z = \sum_E g(E) \exp(-E/k_B T) \quad (1.11)$$

В приведенных соотношениях принято, что  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $Z$  – статистическая сумма,  $g(E)$  – плотность состояний, определяемая общим числом спиновых конфигураций для любого возможного значения энергии из энергетического пространства, по которому, в свою очередь, реализован алгоритм случайных блужданий.

### 1.3. Результаты моделирования.

На рис. 1.3. приведены температурные зависимости намагниченности при  $J = 0.3$ . Четыре кривые соответствуют четырем слоям. Можно видеть, что поведение намагниченности поверхностного слоя существенно отличается от поведения для внутренних слоев, и намагниченность существенно меньше в точке фазового перехода. Данные графики получены для системы с линейными размерами  $N = 100 \times 100 \times 4$ .

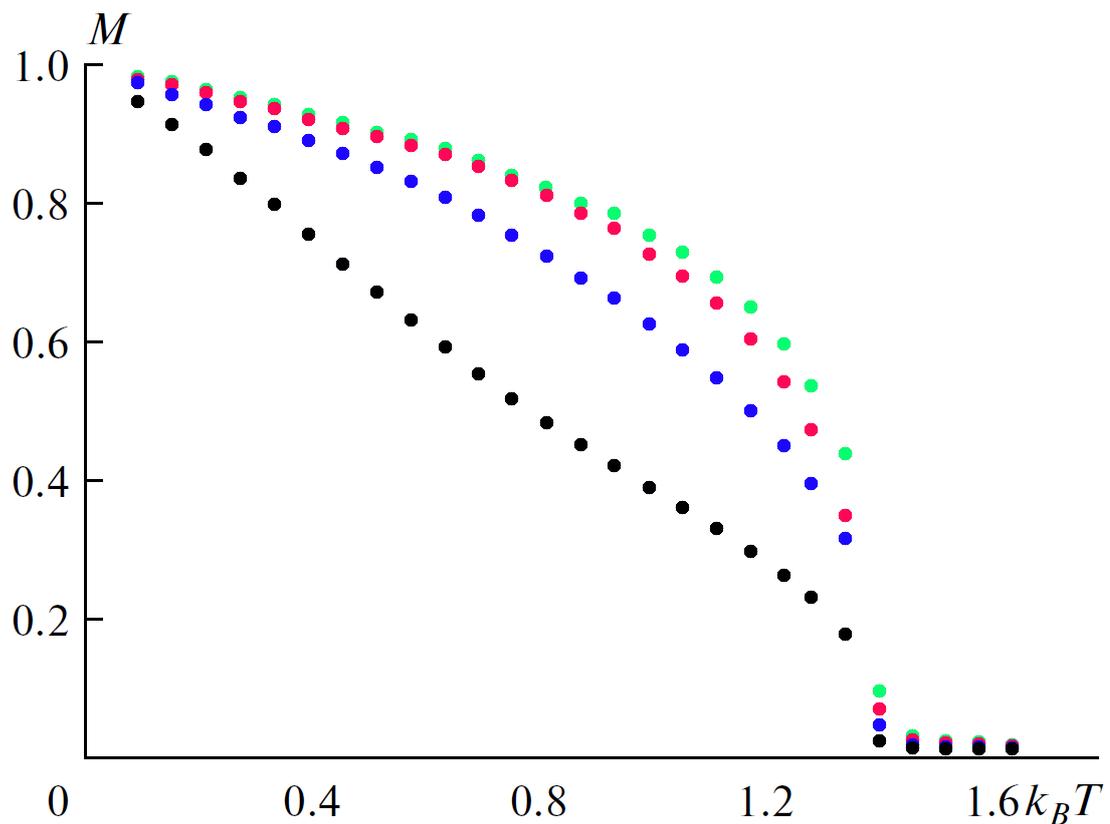


Рис. 1.3. Температурные зависимости намагниченности параметра обменного взаимодействия  $J = 0.3$ . Черная кривая соответствует поверхностному слою.

На рис. 1.4. показаны зависимости от температуры для ферроэлектрического параметра порядка – поляризации, для значения обратной диэлектрической восприимчивости  $k = 0.5$ . Соответственно поведение поляризации поверхностного слоя довольно сильно отличается от поведения поляризации для внутренних слоев.

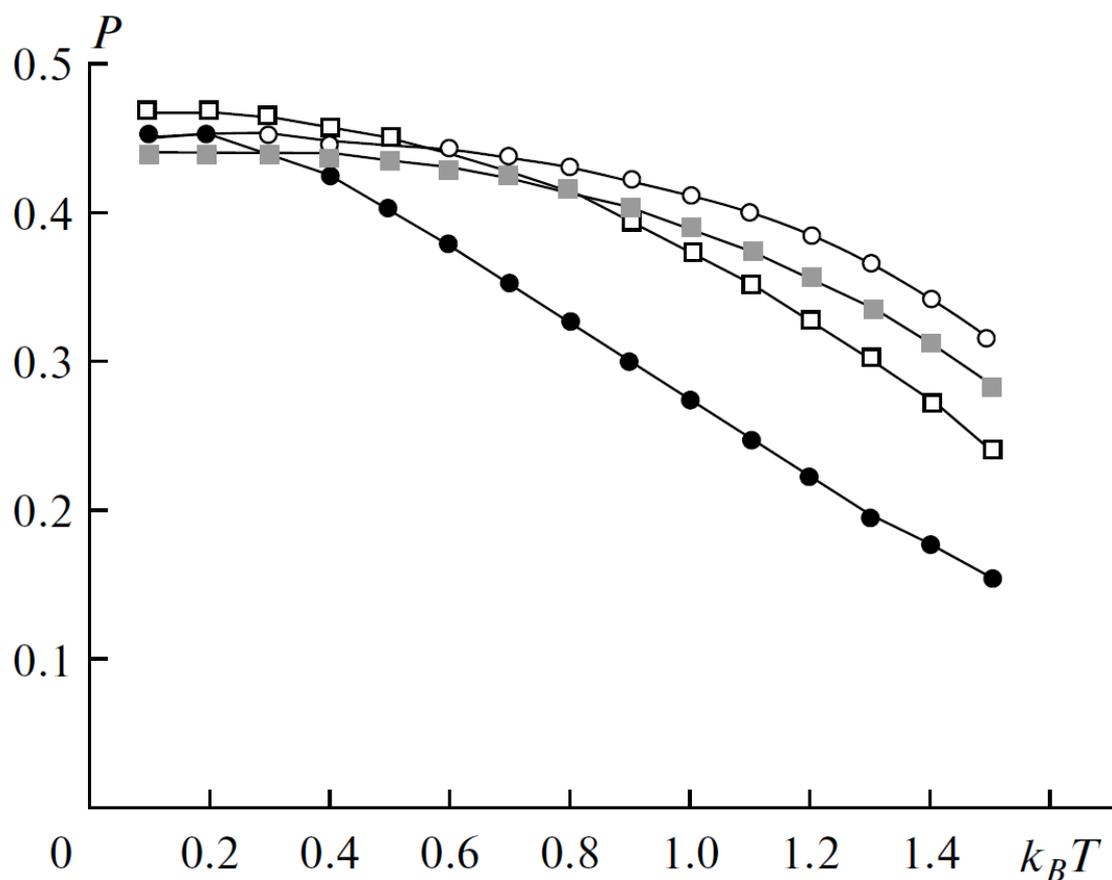


Рис. 1.4. Температурные зависимости ферроэлектрического параметра порядка; соответственно три графика для обратной диэлектрической восприимчивости  $k = 0.5$ . Черная кривая соответствует поверхностному слою.

На Рис. 1.5. показаны температурные зависимости восприимчивости для магнитной и ферроэлектрической подсистем. Верхние четыре кривые являются кривыми магнитной восприимчивости, нижние четыре кривые – соответственно ферроэлектрической.

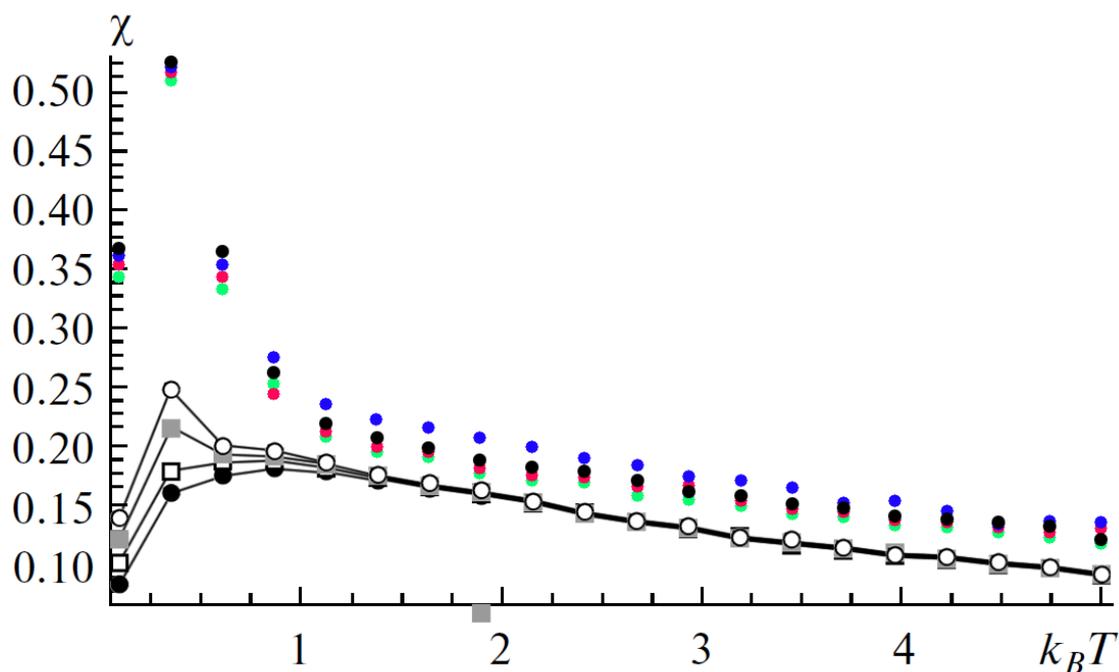


Рис. 1.5. Температурные зависимости восприимчивости для магнитной и ферроэлектрической подсистем.

Результаты нашей работы показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную для магнитной подсистемы и соответствующий переход из антиферроэлектрической фазы мультиферроика являются переходами второго рода. Это можно наблюдать также и по рис. 1.6, на котором представлена энергетическая гистограмма вблизи критической температуры. Видно, что на данной гистограмме наблюдается один максимум, что свидетельствует о фазовом переходе второго рода.

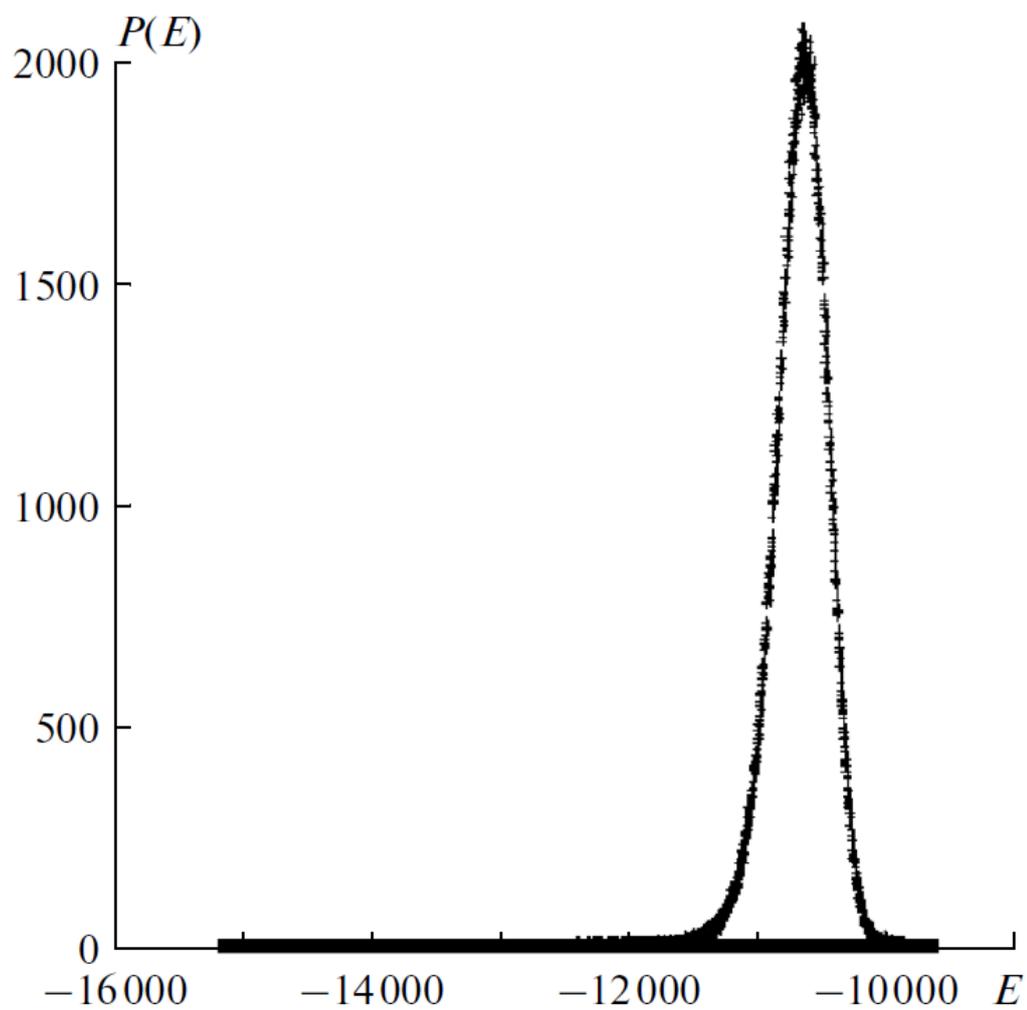


Рис. 1.6. Гистограмма плотности состояний вблизи критической температуры.

## §2. Мультиферроидная сверхрешётка

### 2.1. Модель сверхрешётки

Рассмотрим модель сверхрешётку, состоящую из чередующихся пар магнитных и ферроэлектрических мультислоёв с кубической кристаллической структурой. Сегмент сверхрешётки схематически изображён на Рис. 1.7.

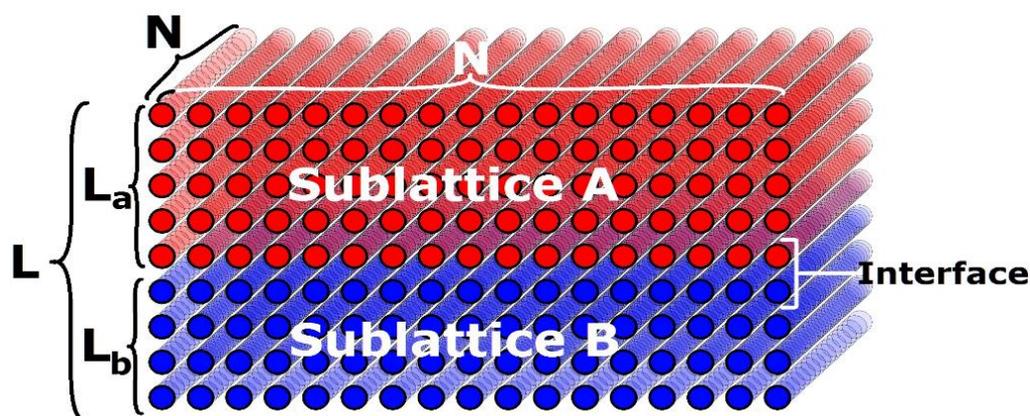


Рис. 1.7. Схематическое изображение сверхрешетки мультиферроика, состоящая из ферромагнитной и ферроэлектрической подрешеток.

Красные и синие кружки представляют подрешётку A (ферромагнитная подсистема) и подрешётку B (ферроэлектрическая подсистема) соответственно. Мы определяем  $L_a$  и  $L_b$  как количество атомных подслоев в подрешётках, а  $L$  — общую толщину слоя элементарной ячейки, поэтому  $L = L_a + L_b$ . Электрическое смещение  $\vec{P}$  и гейзенберговский спин  $\vec{S}$  играют роль ферроэлектрических и ферромагнитных параметров порядка. На интерфейсе вводится магнитоэлектрическое взаимодействие между ферроэлектрическим и ферромагнитным параметрами порядка. Связь между статическими  $P$  и  $M$  может быть только нелинейной, что является результатом взаимодействия зарядовых, спиновых, орбитальных и решеточных степеней свободы. Он всегда присутствует в твердых телах [13], хотя обычно в незначительной степени.

Гамильтониан мультиферроидной сверхрешетки выражается как:

$$H = H_m + H_f + H_{mf} \quad (1.12)$$

Здесь  $H_m$  — гамильтониан ферромагнитной подсистемы,  $H_f$  — гамильтониан ферроэлектрической подсистемы,  $H_{mf}$  — гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела подрешеток.

Опишем гамильтониан подрешетки  $A$  с моделью Гейзенберга на кубической решетке:

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_i (\vec{H} \cdot \vec{S}_i) \quad (1.13)$$

Здесь  $\vec{S}_i$  — спин на  $i$ -м узле,  $\vec{H}$  — напряженность внешнего магнитного поля,  $J_{ij}^m > 0$  — параметр ферромагнитного взаимодействия между спином и его ближайшими соседями (NN), а сумма берется по NN парам спинов. Мы считаем, что  $J_{ij}^m$  одинаково для спинов внутри плоскости подслоя и между спинами соседних подслоев.

Для подрешетки  $B$  запишем:

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij}^f P_i^z P_j^z - \sum_i E^z P_i^z \quad (1.14)$$

Здесь  $P_i^z$  —  $z$ -компонента вектора поляризации на  $i$ -м узле,  $J_{ij}^f > 0$  — параметр взаимодействия между ближайшими соседями, а сумма берется по NN узлам. Подобно ферромагнитной подсистеме, она одинакова для обоих случаев, как внутри подслоя, так и между соседними подслоями. Внешние электрическое поле  $\vec{E}$  и внешнее магнитное поле  $\vec{H}$  направлены вдоль оси  $z$ , перпендикулярной плоскости слоев.

Мы предполагаем, что энергия магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела может быть записана как

$$H_{mf} = - \sum_{i,j,k} J_{ijk}^{mf} [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] \cdot \vec{P}_k \quad (1.15)$$

В этом выражении  $J_{ijk}^{mf} > 0$  — параметр взаимодействия между вектором электрической поляризации  $\vec{P}_k$  в верхнем ферроэлектрическом подслое и спинами  $\vec{S}_i, \vec{S}_j$  в нижнем ферромагнитном подслое (т.е. смежные

интерфейсные слои). Известно, что магнитоэлектрическое взаимодействие способствует наклонной спиновой структуре и конкурирует с двумя обменными взаимодействиями между спинами и векторами поляризации. Обычно магнитное или ферроэлектрическое обменное взаимодействие является ведущим членом гамильтониана, поэтому во многих случаях магнитоэлектрический эффект пренебрежимо мал. В сверхрешётках мультиферроиков магнитоэлектрические взаимодействия имеют решающее значение для создания неколлинеарного дальнего спинового порядка. Результирующая структура зависит от направления вектора электрической поляризации, который, в свою очередь, зависит от симметрии смещения.

Для моделирования используем метод Монте-Карло на основе алгоритма Метрополиса [50] на трехмерной кубической решётке  $N \times N \times L$ .  $N \times N$  обозначают количество спинов в каждом слое сверхрешётки. Периодические граничные условия используются в плоскости  $XY$ , а границы в направлении  $z$  рассматриваются как две свободные поверхности. Исходная конфигурация задается следующим образом: каждому узлу подрешётки  $B$  в направлении  $z$  приписаны ферроэлектрические векторы с абсолютной величиной, выбранной случайным образом из  $(0, \pm 1)$ ; спины для подрешётки  $A$  выбираются равномерно в случайном направлении с единичным модулем ( $|\vec{S}| = 1$ ). В процессе переворота одного спина возможное новое состояние спина выбиралось случайным образом перед каждым испытанием переворота спина. Перевороты могут быть приняты или отклонены в соответствии с алгоритмом Метрополиса. Наши результаты были достигнуты с остальными  $10^5$  шагами Монте-Карло (MCS) на сайт после исключения первых  $10^5$  MCS.

Для моделирования MC мы используем размер выборки  $N \times N \times L$  с  $N = 40 - 400$  и  $L = 8, 16, 12, 24$  для эффектов толщины. Следует отметить, что для подтверждения влияния количества  $N$  на результаты были проведены дополнительные симуляции, но не было обнаружено существенной разницы

при увеличении  $N = 40 - 400$ . Поэтому выбираем для моделирования  $N = 40, L = 8$  (это означает 4 магнитных и 4 ферроэлектрических слоя). Когда мы исследуем влияние обменных связей на магнитные и ферроэлектрические свойства, мы берем одну и ту же толщину для верхнего и нижнего слоёв  $L_a = L_b = 4$ . Для простоты рассмотрим случай, когда параметры взаимодействия одинаковы для всех соседей и положительны. их значения выбраны следующим образом:  $J^m = J^f = 1$ . Магнитоэлектрическое взаимодействие действует между векторами поляризации и ближайшими спинами в соседнем магнитном слое.

## 2.2 Результаты моделирования

Первым шагом моделирования является определение основного состояния путем минимизации энергии, определяемой (1.12). Для определения основного состояния мы используем метод градиентного спуска, численно минимизируя энергию каждого спина один за другим. Мы использовали различные начальные условия для спинов и поляризаций, чтобы проверить сходимость к одному основному состоянию для каждого набора параметров взаимодействия. Выбирая различные направления  $\vec{P}$ , мы определяем основное состояние как функцию  $J^{mf}$ . Пример основного состояния (ОС) показан на Рис. 1.8. и Рис. 1.9. для  $J^{mf} = -0.9$  и  $J^{mf} = -0.75$ . Мы видим, что каждый спин имеет одинаковый угол с четырьмя ближайшими соседями в плоскости XY.

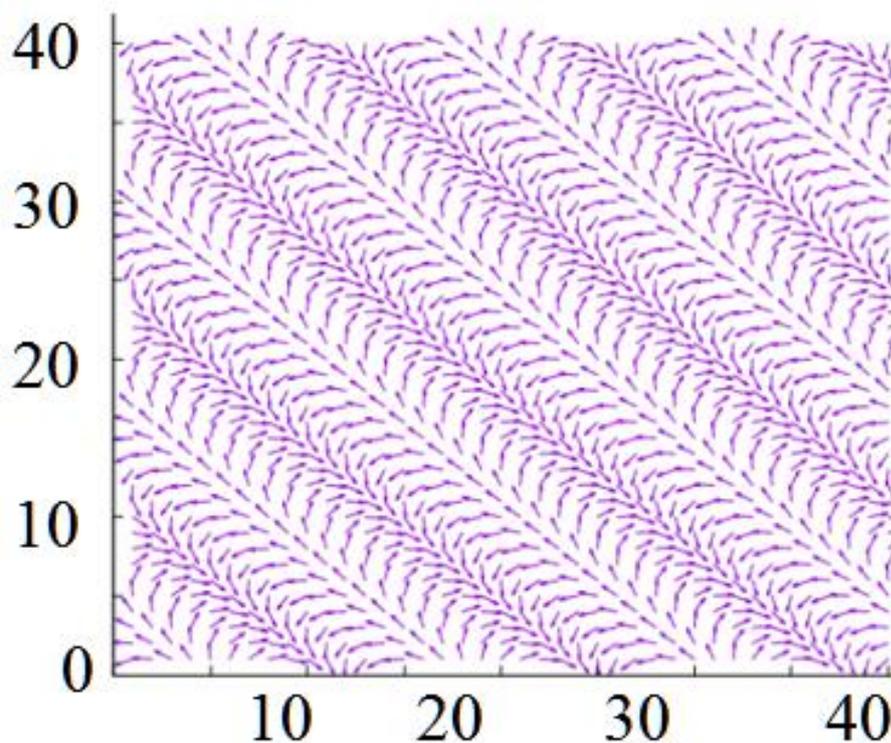
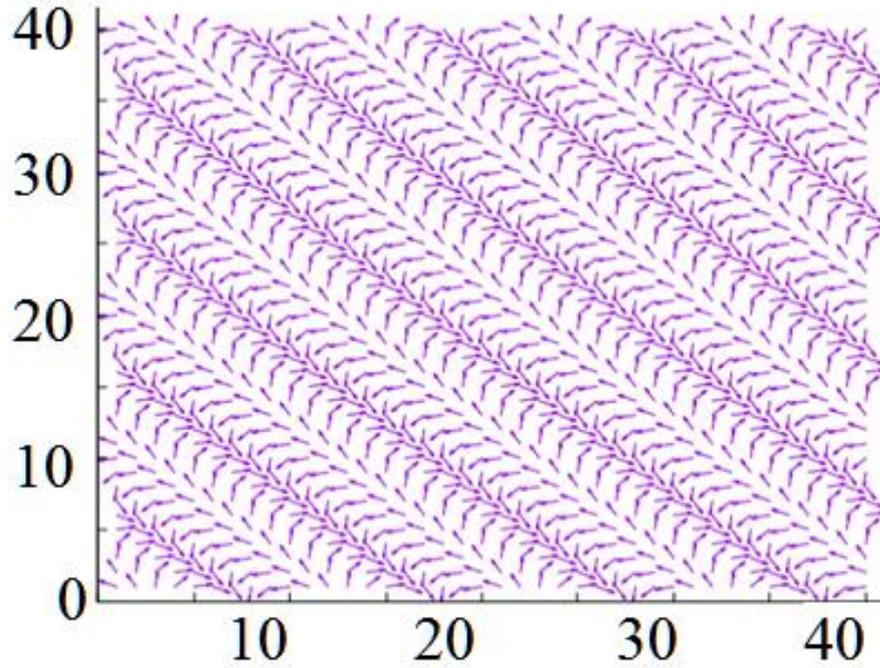


Рис. 1.8. Основное состояние ферромагнитного слоя на интерфейсе сверхрешётки при  $J^m = J^f = 1$  и  $J^{mf} = -0.75$ .



б)

Рис. 1.9. Основное состояние ферромагнитного слоя на интерфейсе сверхрешётки при  $J^m = J^f = 1$  и  $J^{mf} = -0.9$ .

Используя эту конфигурацию ОС, мы нагреваем систему от  $T = 0$  до температуры  $T$  в течение  $t_0 = 10^5$  итераций, а затем усредняем физические величины в течение следующих  $t_a = 10^5$  итераций.

Зная ОС, можно рассчитать параметры порядка сверхрешетки с магнитоэлектрическим взаимодействием между ферромагнитным и ферроэлектрическим подслоями. Мы определяем этот параметр порядка для ферромагнитной подсистемы как проекцию фактической спиновой конфигурации при данном  $T$  на её ОС, а затем усредняем по времени  $t_a$ . Таким образом, параметры порядка для ферромагнитных и ферроэлектрических подсистем определяются как:

$$P_M = \frac{1}{N^2(t_a - t_0)} \sum_{ij} \left| \sum_{t=t_0}^{t_a} S_{ij}(T, t) \cdot S_{ij}^0(T=0) \right| \quad (1.16)$$

$$P_F = \frac{1}{N^2 L_b (t_a - t_0)} \sum_{ij} \left| \sum_{t=t_0}^{t_a} P_{ij}(T, t) \cdot P_{ij}^0(T=0) \right| \quad (1.17)$$

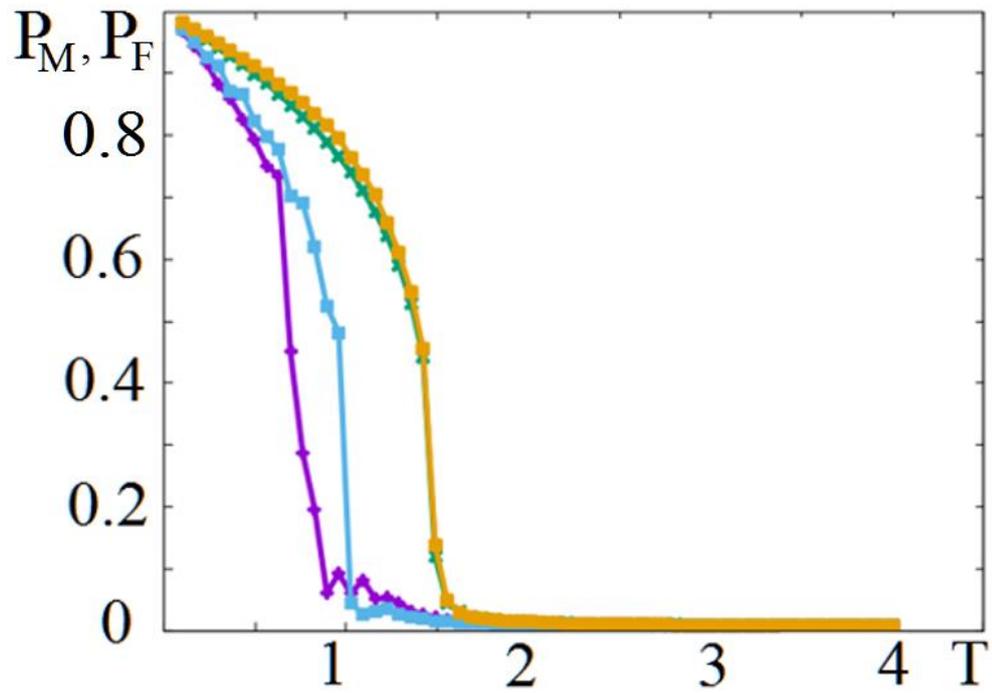


Рис. 1.10. Параметры порядка ферромагнитной и ферроэлектрической подсистем сверхрешётки в зависимости от температуры  $T$ . Фиолетовые и синие линии соответствуют  $P_M$  для  $J^{mf} = -0.2$  и  $J^{mf} = -0.9$ , зеленые и золотые линии соответствуют  $P_F$  для  $J^{mf} = -0.2$  и  $J^{mf} = -0.9$ , соответственно.

Здесь  $S_i(T, t)$  —  $i$ -й спин при итерации  $t$  и температуре  $T$ ,  $S_i^0(T = 0)$  — его состояние в ОС. Аналогично,  $P_i(T, t)$  — это  $i$ -й вектор поляризации в момент времени  $t$  и температуры  $T$ , а  $P_i^0(T = 0)$  — его состояние в ОС соответственно. Параметр порядка  $P_M$  близок к 1 при очень низких  $T$ , когда каждый спин лишь слабо отклоняется от своего состояния в ОС, а  $P_M$  равен нулю при высоких  $T$ , поскольку каждый спин сильно флуктуирует в парамагнитном состоянии. Температурные зависимости этих параметров порядка для  $J^{mf} = -0.2$  и  $J^{mf} = -0.9$  показаны на Рис. 1.10. Энергии ферромагнитной подсистемы в зависимости от  $T$  для тех же значений  $J^{mf}$  показаны на Рис. 1.11.

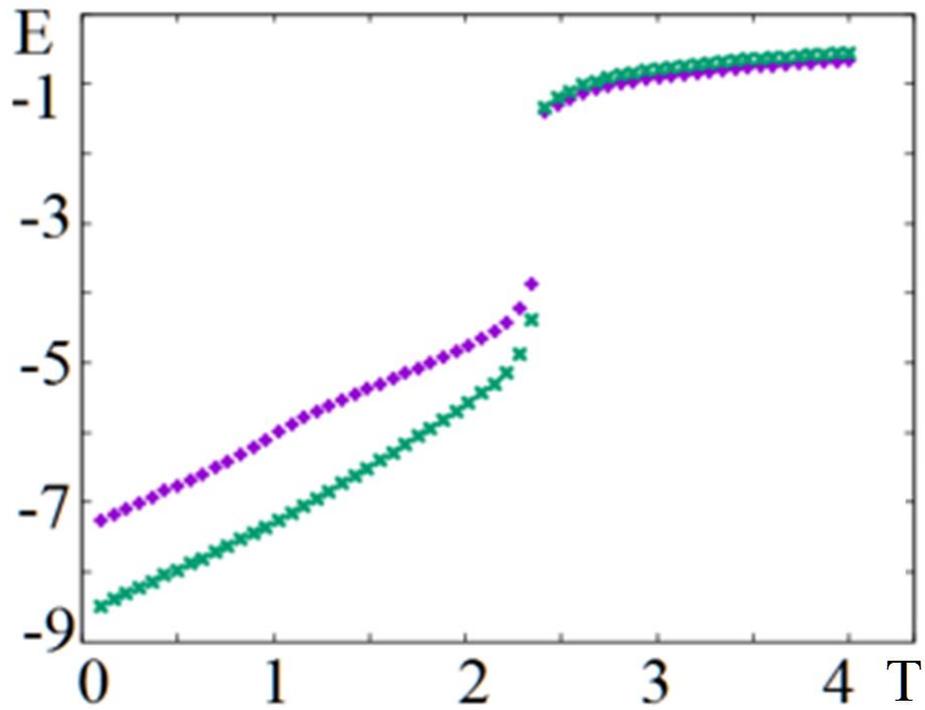


Рис. 1.11. Температурная зависимость энергии ферромагнитной подсистемы для  $J^{mf} = -0.2$  (синяя кривая) и  $J^{mf} = -0.9$  (зелёная кривая).

Как видно из кривых, ферромагнитная система претерпевает фазовые переходы второго рода при  $T_c = 0.69 J^m / k_B$  для  $J^{mf} = -0.2$ ,  $T_c = 0.89 J^m / k_B$  для  $J^{mf} = -0.9$ . Ферроэлектрическая подсистема также претерпевает фазовый переход второго рода, но критическая температура для обоих случаев одинакова,  $T_c = 1.46 J^m / k_B$ . График ферромагнитной восприимчивости для тех же параметров, приведенный на Рис. 1.12., подтверждает эти выводы.

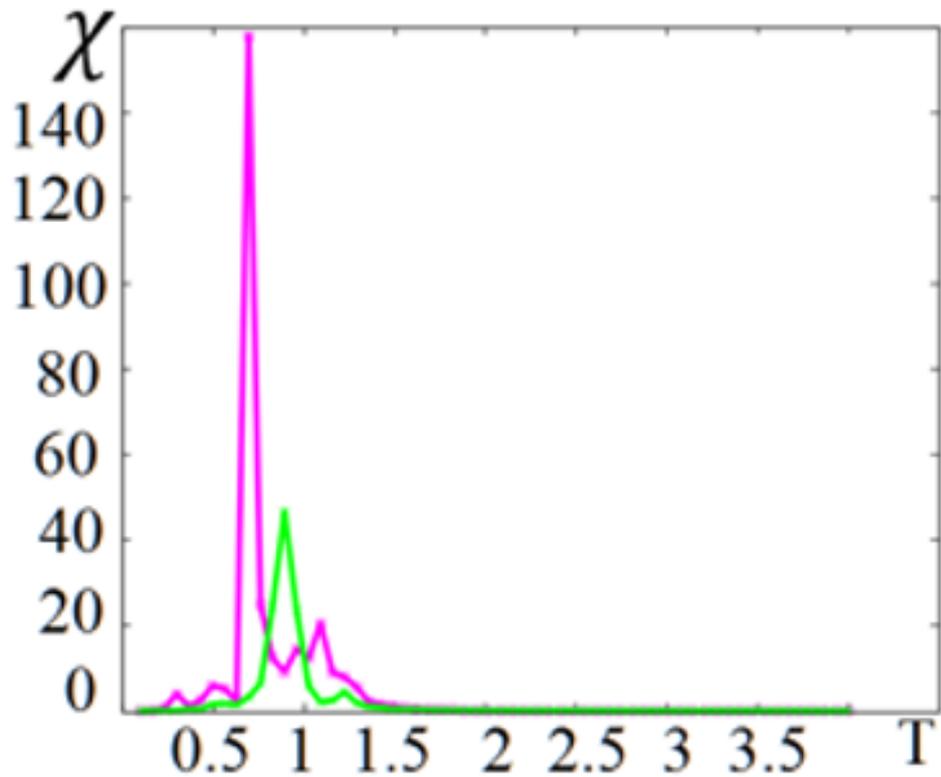


Рис. 1.12. Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  для  $J^{mf} = -0.2$  (фиолетовая кривая) и  $J^{mf} = -0.9$  (зеленая кривая).

На Рис. 1.13. мы видим зависимость ферромагнитного параметра порядка от  $T$ . Фиолетовые и зеленые линии соответствуют  $P_M$  для  $J^{mf} = -2.5$  с  $H^z = 1.0$  и  $H^z = 1.5$ , соответственно; синяя и золотая линии соответствуют  $P_M$  для  $J^{mf} = -6.0$  с  $H^z = 0$  и  $H^z = 1.0$ . Кривые показывают фазовые переходы первого рода при  $T_C = 1.05 J^m/k_B$  для  $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.0$ ,  $T_C = 1.12 J^m/k_B$  для  $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.5$  и  $T_C = 2.25 J^m/k_B$  для  $J^{mf} = -6.0, H^z = 1.0$ . В случае  $J^{mf} = -6.0, H^z = 0$  происходят два фазовых перехода первого рода при  $T_{C1} = 1.05 J^m/k_B$  и  $T_{C2} = 2.19 J^m/k_B$ . Тот факт, что  $P_M$  не обращается в нуль выше  $T_C$ , связан с эффектом приложенного поля.

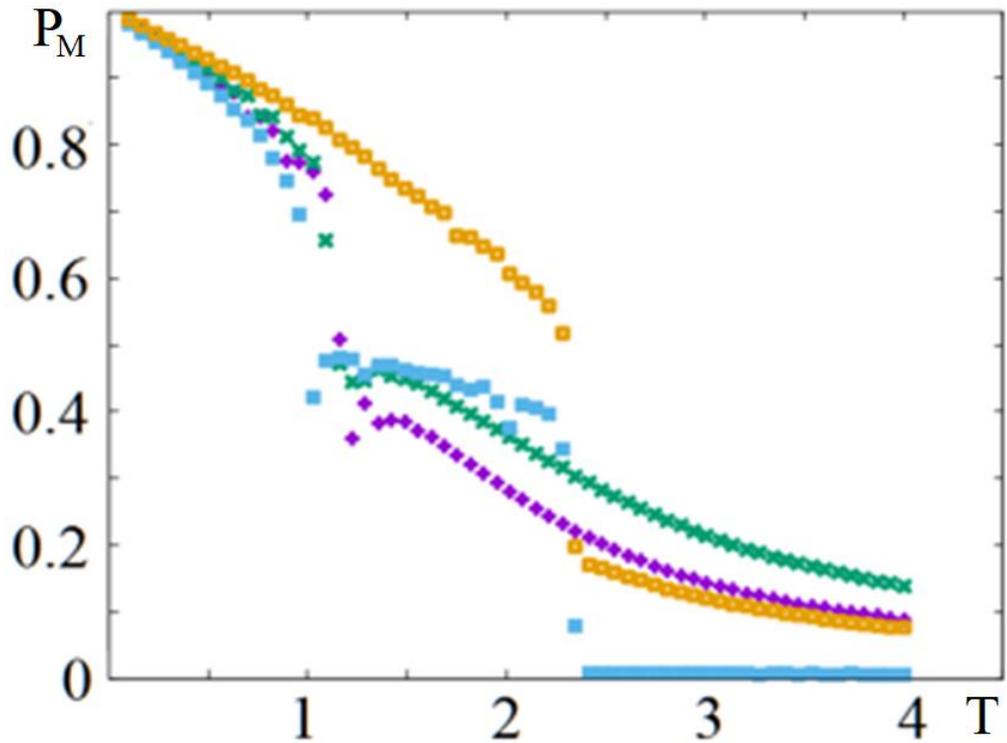


Рис. 1.13. Параметр порядка ферромагнитной подсистемы в зависимости от  $T$ . Фиолетовые и зеленые точки соответствуют  $P_M$  для  $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.0$  и  $J^{mf} = -2.5, H^z = 1.5$  синие и золотые точки соответствуют  $P_M$  для  $J^{mf} = -6.0, H^z = 0$  и  $J^{mf} = -6.0, H^z = 1.0$ .

Кривые на Рис. 1.14., соответствующие энергиям подсистем при  $J^{mf} = -6.0$ , подтверждают сделанные выше выводы. При увеличении параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$  между магнитной и ферроэлектрической подсистемами наблюдается необычное явление. Поверхностные слои (взаимодействующие за счет магнитоэлектрического взаимодействия) после  $J^{mf} = -3.7$  претерпевают фазовые переходы первого рода.

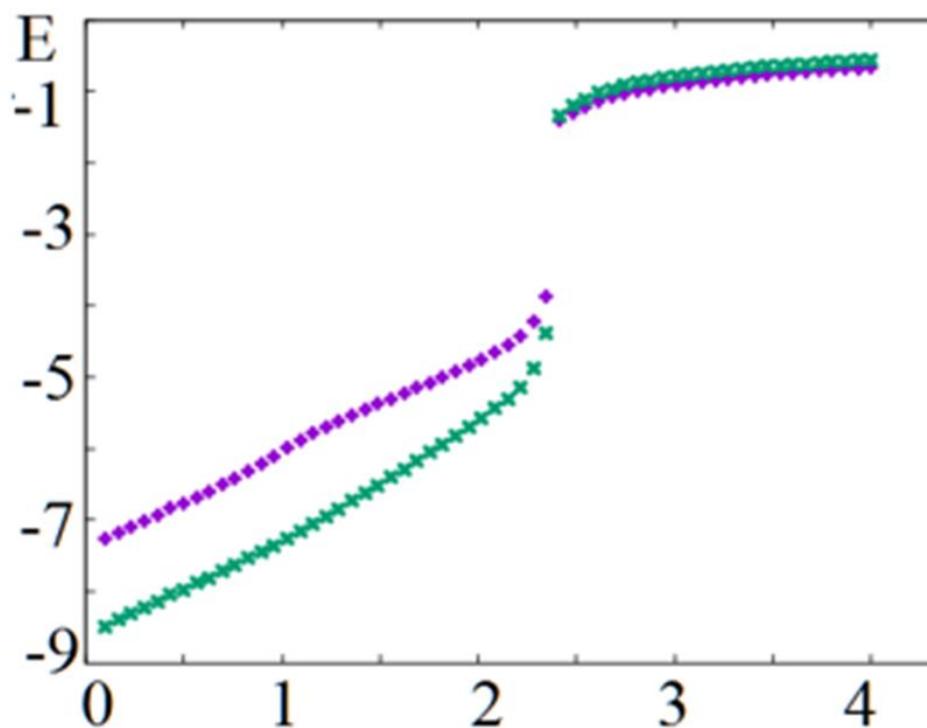


Рис. 1.14. Энергии ферромагнитной (фиолетовые точки) и ферроэлектрической (зеленые точки) подсистем в зависимости от  $T$  при  $J^{mf} = -6.0$ .

Фазовая диаграмма на Рис. 1.15. показывает влияние  $J^{mf}$  на критическую температуру для поверхностного магнитного и ферроэлектрического слоев. Видно, что критическая температура возрастает с увеличением абсолютного значения  $J^{mf}$ . При  $J^{mf} = -3$  и далее критические температуры для магнитного и ферроэлектрического параметра порядка расходятся.

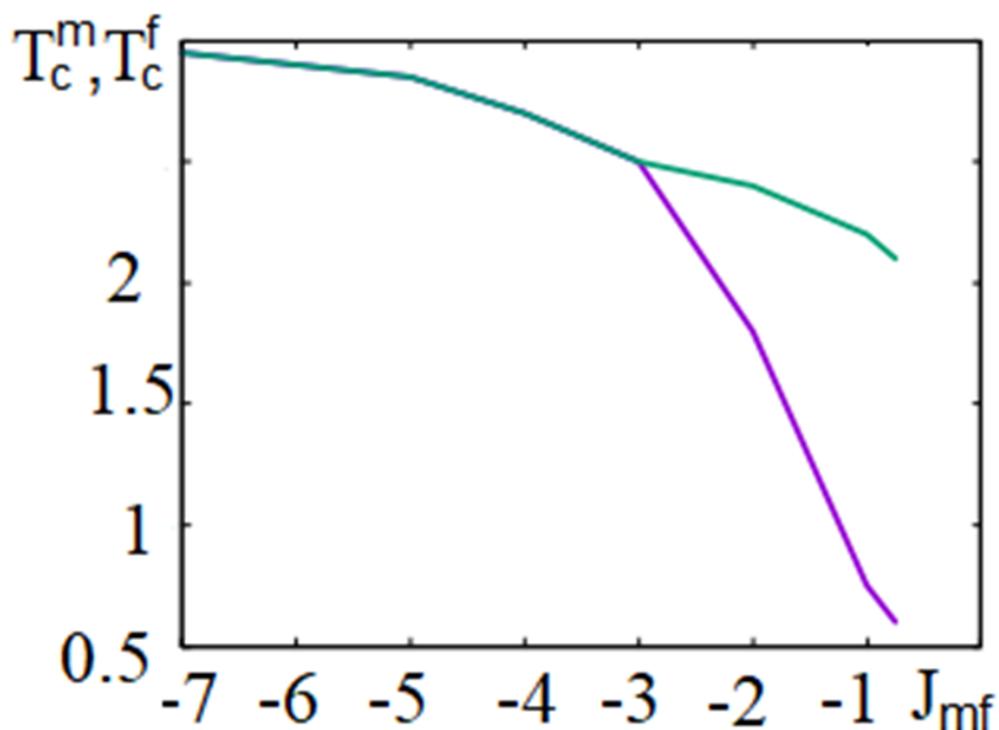


Рис. 1.15. Фазовая диаграмма в плоскости  $T - J^{mf}$  при  $J^m = J^f = 1$ ,  $H^z = E^z = 0$ . Зеленая линия — критическая температура ферроэлектрической подсистемы, фиолетовая — критическая температура магнитной подсистемы.

Фазовая диаграмма на Рис. 1.16. показывает влияние внешнего электрического поля на  $T_C$  для поверхностных магнитных и ферроэлектрических слоев. Можно обнаружить, что критическая температура почти постоянна при  $E^z \leq 0.5$ . Показано, что при большом значении  $J^{mf}$  ( $J^{mf} = -3.0$ ) критическая температура не чувствительна к внешнему электрическому полю, так как магнитоэлектрическая связь оказывает сильное влияние на характер перехода. Для  $E^z > 0.5$  критическая температура уменьшается при увеличении значения  $E^z$ . При  $J^{mf} = -3.5$  и далее критические температуры для магнитного и ферроэлектрического параметра порядка совпадают.

Мы изучили эффекты конечного размера на фазовых переходах при  $T_C$  и увидели, что начиная с  $N = 40$  все кривые совпадают в пределах

статистических погрешностей: так что для  $NN \geq 1600$  не наблюдается никаких эффектов конечного размера.

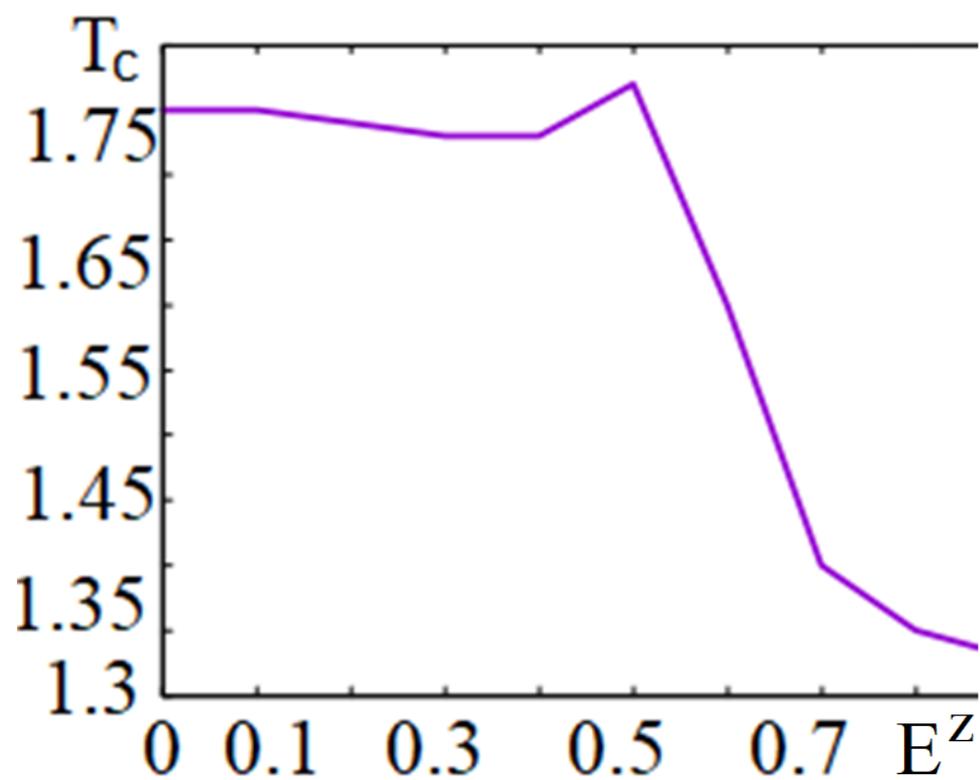


Рис. 1.16. Фазовая диаграмма энергии поверхности ОС в плоскости  $T - E^z$  для  $J^m = J^f = 1, H^z = 0, J^{mf} = -3.5$ .

## Выводы к главе

Исследовано влияние температуры, внешних магнитных и электрических полей, магнитоэлектрической связи и поверхностных эффектов на мультиферроидную сверхрешётку, образованную чередующимися магнитными и ферроэлектрическими подслоями. Магнитная подсистема в данной работе моделировалась как простая кубическая решетка со спинами Гейзенберга. Электрическая поляризация  $(0, \pm 1)$  была случайным образом назначена каждому узлу простой кубической решетки в подслоях ферроэлектриков в направлении  $z$ . Показана зависимость намагниченности слоя от температуры при различных взаимодействиях и параметрах полей. Нами установлено, что при значении магнитоэлектрического взаимодействия выше критического значения  $J_C^{mf} = -3.7$  в системе происходит фазовый переход второго рода, а выше этого значения - фазовый переход первого рода.

## **Глава 2. Скирмионы и фазовые переходы в ферромагнитно-ферроэлектрических сверхрешётках с треугольной симметрией**

В этой главе исследовано образование скирмионного кристалла с неколлинеарным магнитоэлектрическим взаимодействием на границе ферроэлектрического слоя и магнитного слоя с треугольной решеткой в ферромагнитно-ферроэлектрической сверхрешётке и его фазовый переход. Изучено, при каких значениях параметра магнитоэлектрического взаимодействия и внешнего магнитного поля скирмионы возникают на интерфейсах сверхрешётки, а также исследована их стабильность.

Основные результаты второй главы диссертации опубликованы в статьях [115, 116].

## §1. Модель

В данной главе изучается сверхрешётка, состоящая из магнитных и ферроэлектрических пленок, в которых спины и диполи находятся на узлах треугольной решетки. Все взаимодействия ограничены ближайшими соседями. Полный гамильтониан такой системы запишем как:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_{i,j,k} J^{mf} e_{i,j} \vec{P}_i \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] - \sum_{\langle i \rangle} \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (2.1)$$

Здесь  $\vec{S}_i$  – Гейзенберговский спин на  $i$ -м узле,  $J_{ij}^m = J^m > 0$  – параметр ферромагнитного взаимодействия между спином и 6 ближайшими соседями в магнитном слое. Внешнее магнитное поле  $\vec{H}$  приложено вдоль оси  $Oz$ , перпендикулярной плоскости слоёв.  $\vec{P}_i$  — электрический диполь на  $i$ -м узле решётки, направленный вдоль оси  $Oz$ , что он может иметь произвольную амплитуду:  $P_i^x = P_i^y = 0, -1 \leq P_i^z \leq 1$ .  $J_{ij}^f = J^f > 0$  – параметр ферроэлектрического взаимодействия между диполем и 6 ближайшими соседями.  $J^{mf} < 0$  – параметр магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе между спинами и ближайшими диполями. Коэффициент  $e_{i,j} = -e_{j,i} = 1$  введен для нейтрализации антисимметрии спинового произведения.

$\vec{D}^{i,j} = J^{mf} e_{i,j} \vec{P}_i$  – вектор Дзялошинского-Мория, перпендикулярный плоскости слоёв, пропорциональный ближайшему диполю  $\vec{P}_i$ , при таком выборе энергия магнитоэлектрического взаимодействия максимальна, когда спины лежат в плоскости плёнки (рис. 2.1).

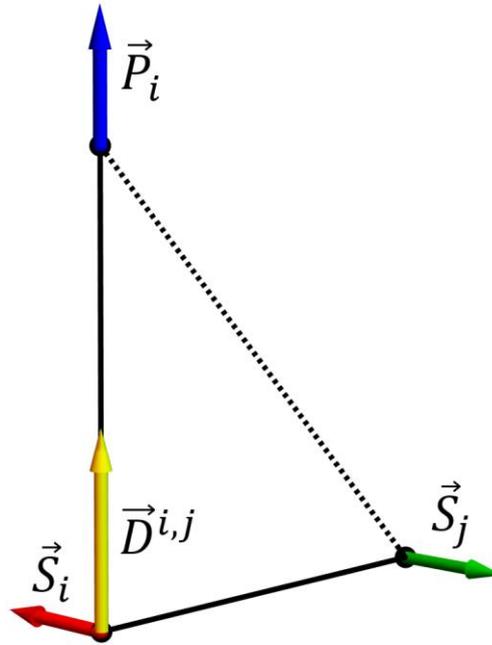


Рис. 2.1. Схема магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе. Жёлтым цветом обозначен вектор Дзялошинского-Мория, перпендикулярный плоскости магнитного слоя.

Определим спиновые конфигурации основного состояния в случае магнитного монослоя, окружённого двумя ферроэлектрическими слоями. Ферромагнитное обменное взаимодействие между спинами будет конкурировать с перпендикулярной конфигурацией  $\vec{P}_i \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$ . Полученная конфигурация неколлинеарна. Отметим, что ферроэлектрическая плёнка всегда имеет поляризации вдоль оси  $z$ , обусловленные их изинговским характером, даже в присутствии интерфейсного магнитоэлектрического взаимодействия.

По симметрии каждый спин имеет одинаковый угол  $\gamma$  со своими шестью соседями в плоскости  $XY$ . Энергия спина  $\vec{S}_i$  определяется выражением

$$E_i = -6J^m S^2 \cos(\gamma) + 12J^{mf} P^z S^2 \sin(\gamma) \quad (2.2)$$

Здесь  $\gamma = |\gamma_{i,j}|$ . Следует обращать внимание на знаки  $\sin(\gamma_{i,j})$  при суммировании по соседям: два противоположных соседних узла имеют противоположные знаки произведений спина и противоположные коэффициенты  $e_{i,j}$ . Заметим, что коэффициент 12 при втором слагаемом

обусловлен тем, что каждый спин имеет по 6 пар взаимодействий с поляризацией в верхней и нижней ферроэлектрических плоскостях (в случае магнитного монослоя). Минимизация  $E_i$  дает, принимая  $P^z = 1$  в основном состоянии и  $S=1$ ,

$$\frac{dE_i}{d\gamma} = 0 \Rightarrow \gamma = \arctan\left(\frac{-2J^{mf}}{J^m}\right) \quad (2.3)$$

Отсюда следует, что когда  $J^{mf} \rightarrow 0$  также и  $\gamma \rightarrow 0$ , а когда  $J^{mf} \rightarrow -\infty$ ,  $\gamma \rightarrow \pi/2$  как и ожидалось. В этой главе рассматривается случай  $J^{mf} < 0$  поэтому  $\gamma > 0$ .

## §2. Основное состояние сверхрешётки

В случае многослойной пленки, угол между ближайшими соседями в каждом магнитном слое отличен от угла в соседнем слое. Основное состояние (ОС) определяется путём численной минимизации энергии каждого спина методом градиентного спуска, как описано в [90]. Для моделирования были выбраны размеры сверхрешётки  $N \times N \times L$ , где  $N = 40$  – ширина и длина сверхрешётки,  $L = L_m + L_f = 8$ ,  $L_m = L_f = 4$  – толщины магнитных и ферроэлектрических слоёв соответственно, а во всех 3 направлениях  $Ox, Oy, Oz$  наложены периодические граничные условия. Обменные параметры между спинами и поляризациями принимаются  $J^m = J^f = 1$ .

Примеры основного состояния магнитного пограничного слоя в нулевом поле показаны на Рис. 2.2 при малом значении магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} = -0.5$ . В этом случае конфигурация спинов в ОС имеет периодическую неколлинеарную структуру: каждый спин имеет один и тот же угол поворота  $\gamma$  со своим ближайшим соседом как в направлении  $Ox$ , так и в направлении  $Oy$ . Расчёты с различными значениями  $J^{mf}$  показывают, что периодичность диагональных параллельных линий сильно зависит от величины параметра магнитоэлектрического взаимодействия.

При увеличении значения параметра магнитоэлектрического взаимодействия периодичность спиновой структуры уменьшается. Такая зависимость объясняется тем, что угол  $\gamma$  между двумя соседними спинами определяется формулой (2.3) что даёт следующее выражения для периодичности  $\sigma$  (единица шага решетки) в каждом направлении:

$$\sigma = \frac{2\pi}{\gamma} = 2\pi / \arctan\left(\frac{-2J^{mf}}{J^m}\right) \quad (2.4)$$

Таким образом, периодичность сокращается при увеличении  $|J^{mf}|$ .

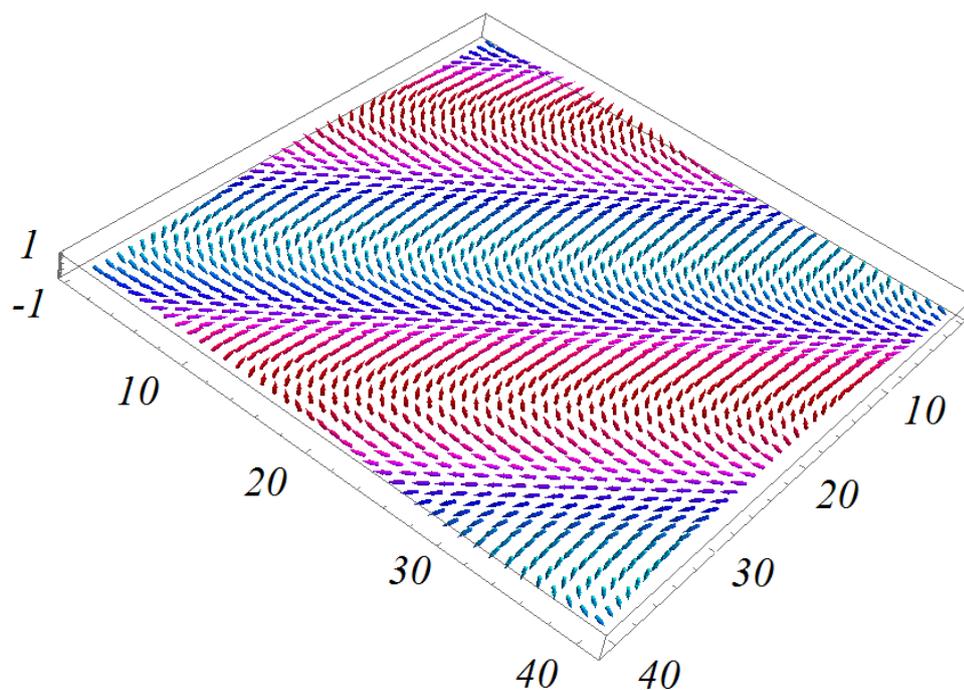


Рис. 2.2. Конфигурация основного состояния магнитного слоя на интерфейсе сверхрешётки при  $H = 0$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -0.5$

С увеличением значения параметра магнитоэлектрического взаимодействия возрастает и конкуренция между неколлинеарными магнитоэлектрическими взаимодействиями. В результате в области параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $[-0,75, 0]$  формируется периодическая неколлинеарная структура основного состояния. На Рис. 2.3 показан пример с  $J^{mf} = -0.85$ , где мы можем наблюдать скирмионы на границе раздела и во внутреннем магнитном слое.

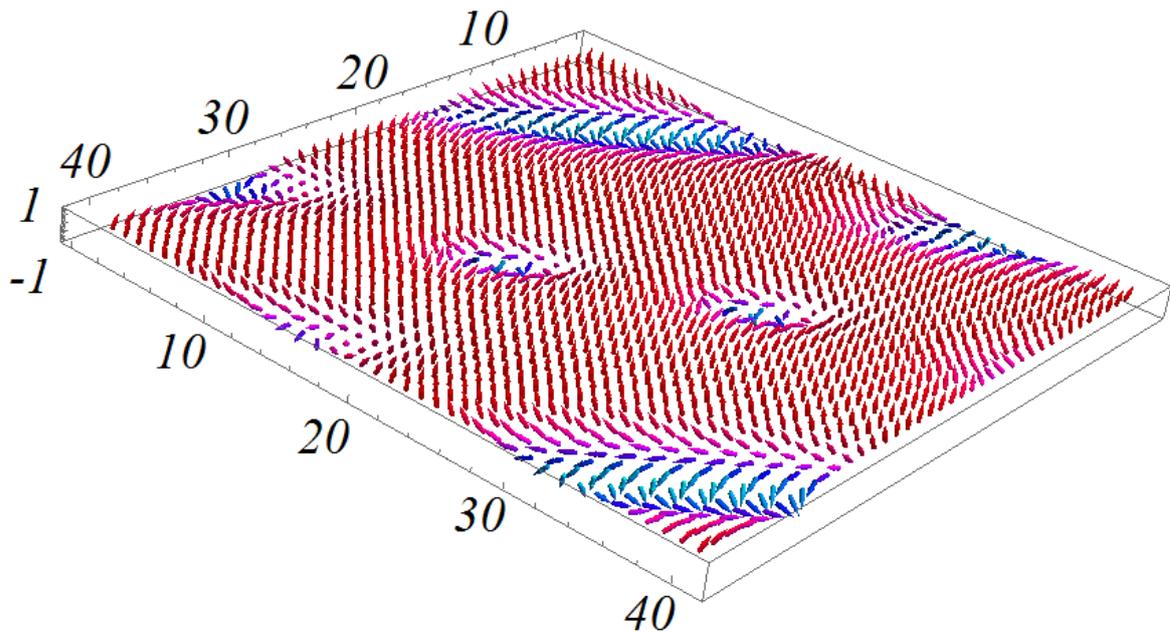


Рис. 2.3. Конфигурация основного состояния интерфейса сверхрешётки мультиферроика при  $H = 0$ ,  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -0.85$

На Рис. 2.4 представлена зависимость числа скирмионов на интерфейсном магнитном слое  $n$  от параметра интерфейсного магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$ . Мы видим, что по мере усиления магнитоэлектрического взаимодействия число скирмионов стремится к 6. Наибольшее значение  $J^{mf}$ , при котором скирмионную структуру можно наблюдать в нулевом магнитном поле, имеет место при  $J^{mf} = -1.0$ . Следует отметить, что такие скирмионы при нулевом поле не наблюдались в пленках с простой кубической решеткой как во фрустрированном, так и в нефрустрированном случаях. Отметим, что скирмионы в ферромагнитных/ферроэлектрических сверхрешетках с треугольной симметрией могут рождаться в области  $J^{mf} \in [-1.0, -0.75]$  при нулевых значениях приложенного магнитного поля и распределяются в трехмерном пространстве в ферромагнитной пленке.

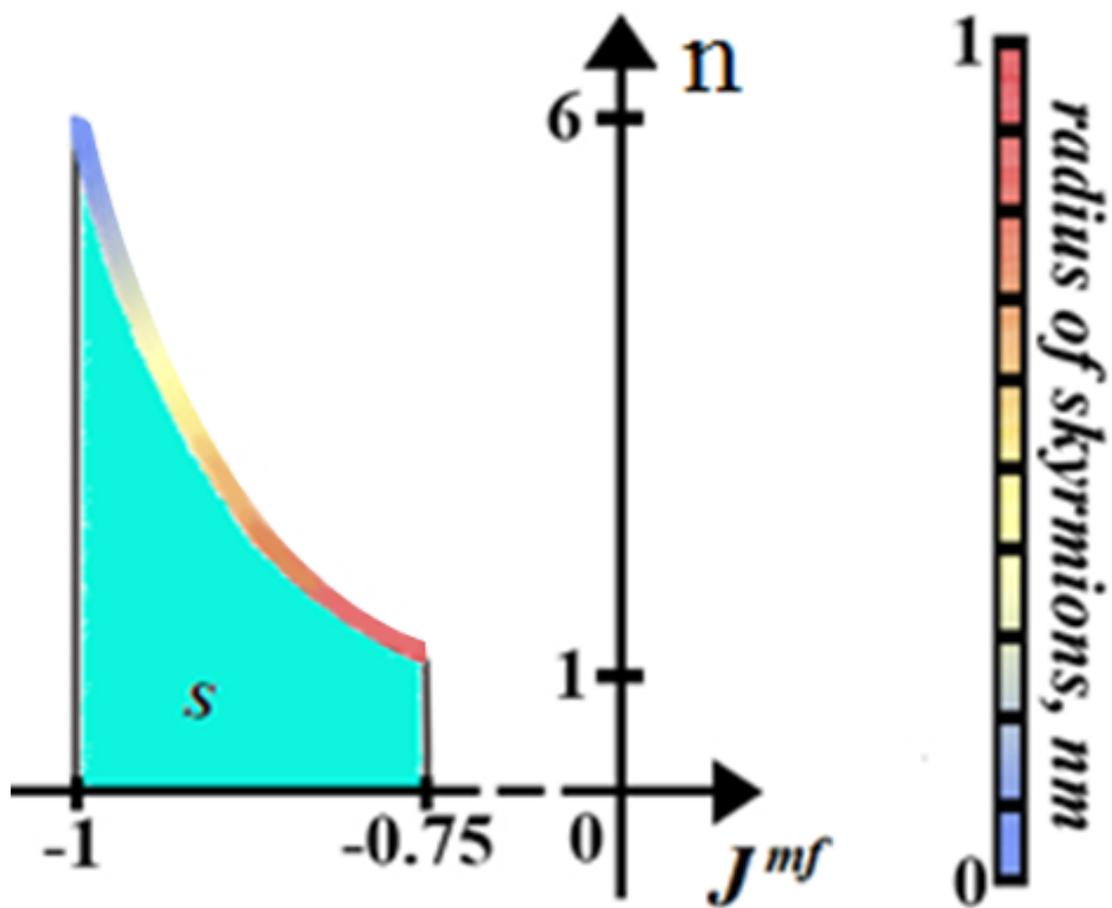


Рис. 2.4. Зависимость радиуса и количества скирмионов  $n$  на интерфейсном магнитном слое от параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf}$  при  $H = 0$ ,  $J^m = J^f = 1$ . Скирмионная фаза обозначена буквой  $S$ .

### §3. Основное состояние в присутствии внешнего магнитного поля

При приложении магнитного поля в направлении  $Oz$  перпендикулярно плоскости пленок возникает конкуренция между ферромагнитным обменом, магнитоэлектрическим взаимодействием между спинами и диполями на интерфейсных слоях и внешним магнитным полем. Рассмотрим критическое значение параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} = -1$ : при этом значении скирмионная фаза коллапсирует при  $H=0$  на треугольной решетке. Показано, что ОС в этой точке, а именно,  $J^m = 1.0, J^f = 1.0, J^{mf} = -1.0$ , очень чувствительна к приложенному магнитному полю - при малой величине формируется четкая и периодическая скирмионная структура. Н. Решетка скирмиона сформирована с идеальной симметрией. Фаза скирмиона при критическом значении  $J^{mf} = -1.0$  устойчива в области внешнего магнитного поля  $|H| \in (0,01 \dots 0,24)$ . При  $|H| > 0,24$  все спины параллельны оси  $z$  в случае  $J^{mf} = -1.0$ .

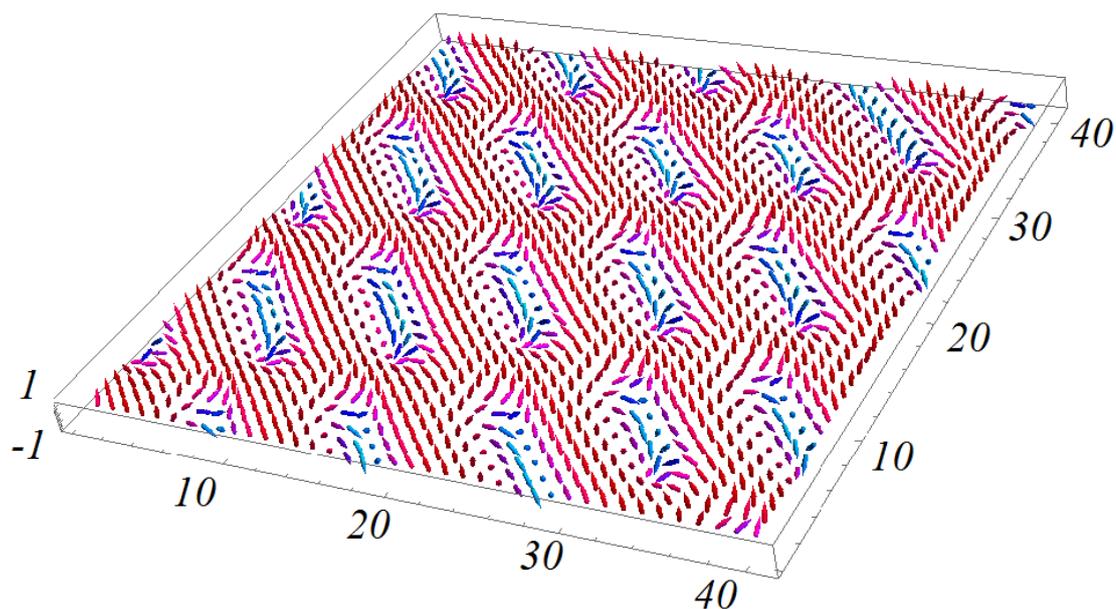


Рис. 2.5. Конфигурация основного состояния интерфейса сверхрешётки мультиферроика при  $H = 0.5, J^m = J^f = 1, J^{mf} = -1.75$ .

В этой модели в нулевом поле мы наблюдаем случайное пространственное трехмерное распределение скирмионов. Однако в

приложенном поле мы наблюдаем кристаллическую структуру скирмионов при сильном магнитоэлектрическом взаимодействии, как в случаях, показанных на Рис. 2.5. При возрастании параметра магнитоэлектрического взаимодействия стабильность решетки скирмионов по отношению к величине приложенного магнитного поля увеличивается. Например, на Рис. 2.5. показан случай идеальной скирмионной структуры при  $at J^m = 1.0, J^f = 1.0, J^{mf} = -1.75, H = 0.5$ .

#### §4. Размерные эффекты

Очень важно измерять размерные эффекты при численном моделировании. Влияние общей толщины  $L$  магнитного и ферроэлектрического слоев очень существенно. Мы провели расчеты для систем с различными размерами  $N \times N \times L$ , где  $N$  варьировалось от 40 до 1000, а толщина  $L$  варьировалась от 2 до 36.

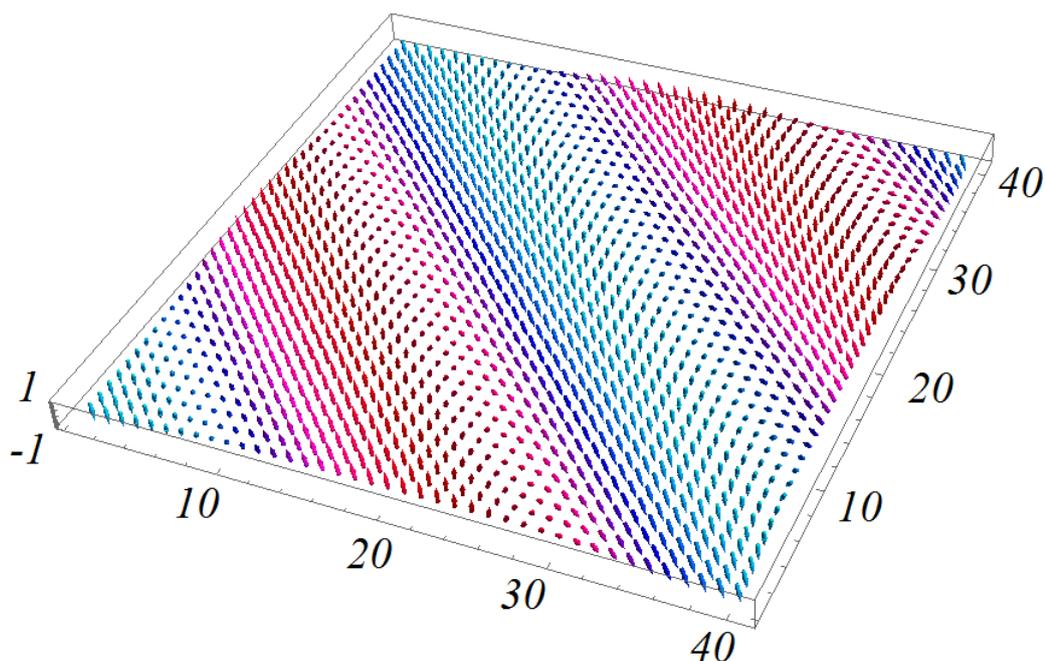


Рис. 2.6. Трехмерный вид конфигурации ОС на интерфейсе для  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -0.85$  для размера  $N=40$  и толщины  $L=14$  соответствуют  $L_m = L_f = 7$ .

Для ОС мы обнаружили, что размерный эффект  $N$  незначителен. Что касается толщины пленки, то мы наблюдали очень интересное явление в сверхрешетках с различной толщиной магнитной и ферроэлектрической пленки: толщина ферроэлектрической пленки  $L_f$  не влияет на устойчивость скирмионной структуры. Напротив, толщина  $L_m$  магнитной пленки на треугольной решетке определяет стабильность скирмионной структуры: скирмионы образуются только в области  $L_m$  между 4 и 6 в нулевом магнитном поле. На Рис. 2.3. мы видим, что в случае  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -0.85$ ,  $N = 40$  и толщины  $L = 8$  ( $L_m = L_f = 4$ ) скирмионы распределены в

трехмерном пространстве. Мы обнаружили два случая, лежащих вне этой области:  $L_m = L_f = 2$  и  $L_m = L_f = 7$  (Рис. 2.6.). В обоих случаях мы видим не скирмионы, а неколлинеарную структуру, как на Рис. 2.3.

Можно наблюдать, что скирмионная фаза существует в нулевом поле только в узкой области значений  $L_m$ , что обусловлено несколькими причинами:

1) для двухслойного случая ( $L_m = 2$ ) каждый магнитный слой сильно взаимосвязан с ферроэлектрическим слоем, поэтому его структура определяется уравнением (2.4). Ферромагнитное взаимодействие между двумя магнитными слоями недостаточно сильное, чтобы нарушить эту структуру.

2) для  $L_m > 6$  внутренние магнитные слои, вдали от двух граничных ферроэлектрических слоев, имеют ферромагнитную структуру, которая доминирует над всей магнитной структурой пленки.

3) при  $2 < L_m < 7$  энергия ферромагнитного упорядочения сравнима с энергией неколлинеарной границы раздела. Это порождает конкуренцию между ними, в результате чего образуется скирмионная структура.

## §5. Результаты моделирования и обсуждение результатов

Мы использовали алгоритм Метрополиса для моделирования системы при  $T \neq 0$ . Мы выполнили расчеты для систем с различными размерами  $N \times N \times L$  где  $N=40, 60, 80, 100, 400, 1000$  и  $L=2, 4, 8, 12, 14, 20, 36$ . Следует отметить, что изменение латеральный размер  $N$  не влияет на результаты по скирмионам, показанные в статье. Мы использовали  $N = 40$  и  $L_m = L_f = 4$ . При такой толщине скирмионы наблюдались в двух внутренних слоях, как показано в предыдущем разделе. Обычно мы отбрасываем  $10^6$  итераций Монте-Карло (МКИ) на спин, чтобы уравновесить систему, средние энергии и параметры порядка в течение следующих  $10^6$  МКИ/спин.

Для магнитных слоев, в которых спиновая конфигурация не коллинеарна, параметр порядка слоя  $n$  можно рассчитать по формуле:

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

где  $\mathbf{S}_i(T, t)$  —  $i$ -й спин в момент времени  $t$  и при ненулевой температуре  $T$ , а  $\mathbf{S}_i^0(T = 0)$  обозначает его ориентацию при нулевой температуре. Мы сравниваем реальную конфигурацию, полученную при медленном нагреве выбранной ОС, проецируя ее на выбранную ОС. В нашем случае скирмионной структуры мы наблюдали, что ОС устойчив до конечного  $T$ . Параметр порядка  $M_m(n)$  изменяется с  $T$  и стремится к нулю при фазовом переходе [91].

На Рис. 2.7. показаны зависимость магнитной энергии и магнитного параметра порядка от температуры  $T$  без внешнего магнитного поля для различной величины магнитоэлектрического взаимодействия. Красная кривая на рис. ба соответствует набору  $J^m = J^f = 1.0$ ,  $J^{mf} = -1.0$ , что совпадает с результатом для  $J^m = J^f = 1.0$ ,  $J^{mf} = -1.75$ . Изменение кривизны происходит при  $T_c^m \sim 1.75$  для обоих случаев, а это означает, что магнитоэлектрическое взаимодействие не влияет на температуру магнитного фазового перехода в столь большом диапазоне  $J^{mf} \in (-1.75, \dots, -1.0)$ . В

этой области  $J^{mf}$  мы не имеем скирмионов на границе раздела без внешнего поля. Отметим, что в случае магнитоэлектрической сверхрешетки с простой кубической решеткой параметр  $J^{mf}$  сильно влияет на критическую температуру [67]. Зависимость параметров магнитного порядка от  $T$ , показанная на Рис. 2.8. (красные и зеленые точки), подтверждает фазовый переход из неколлинеарной фазы в парамагнитную фазу, происходящий при температурах, что видно по изменению кривизны энергии на рис. 2.7. На рис. 2.7. также показан случай, когда  $J^m = J^f = 1.0$ , с сильным значением  $J^{mf}$ :  $J^{mf} = -4.25$  (синяя линия). Как видно, при сильном магнитоэлектрическом взаимодействии на границе раздела фазовый переход не наблюдается: параметр порядка никогда не обращается в нуль, как видно на Рис. 2.8. (синяя кривая).

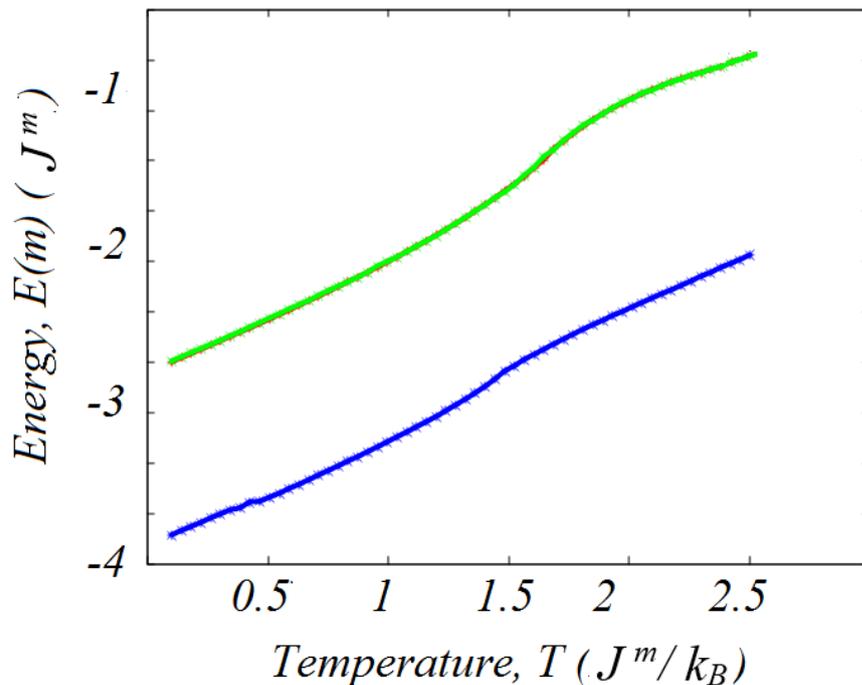


Рис. 2.7. Энергия магнитной пленки на треугольной решетке в зависимости от температуры  $T$  для  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.0$  и  $J^{mf} = -1.75$  (зеленая кривая), и  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -4.25$  (синяя кривая).

Отметим, что в случае простой кубической решетки мы наблюдали очень сильный фазовый переход первого рода при больших значениях

межфазного магнитоэлектрического взаимодействия [114]. Отметим, что результаты моделирования методом Монте-Карло представлены в безразмерных единицах: энергия в единицах параметра ферромагнитного взаимодействия  $J^m$  и  $T$  в единицах  $J^m/k_B$  ( $k_B$  - постоянная Больцмана). Мы можем рассчитать энергию в джоулях, умножив значение энергии на Рис. 2.7. на значение  $J^m$ .

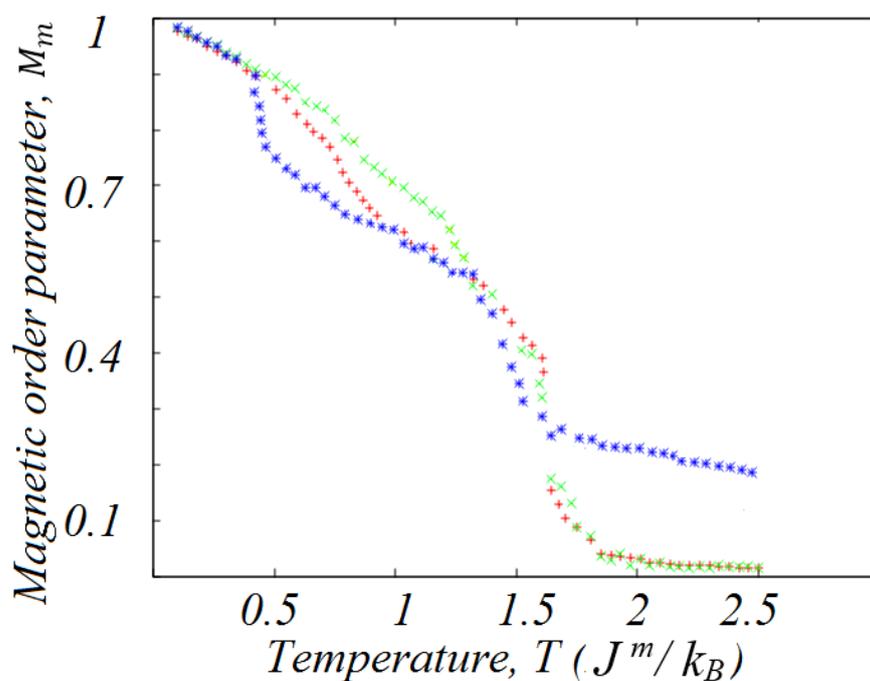


Рис. 2.8. Параметр порядка магнитной пленки в зависимости от температуры при  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -1.0$  и  $J^{mf} = -1.75$  (зеленая кривая), и  $J^m = J^f = 1$ ,  $J^{mf} = -4.25$  (синяя кривая).

## Выводы к главе

В этой главе показано, что скирмионы в основном состоянии в магнитоэлектрических сверхрешетках с треугольной симметрией формируются в области  $J^{mf} \in [-1.0, -0.75]$  в отсутствие внешнего магнитного поля и распределяются в трехмерном пространстве ферромагнитного слоя. В магнитоэлектрических сверхрешетках с кубической симметрией такого эффекта не наблюдается.

Толщина ферроэлектрической пленки магнитоэлектрической сверхрешетки не влияет на устойчивость скирмионной структуры и напротив, толщина магнитной пленки определяет стабильность скирмионной структуры: скирмионы формируются только для диапазона слоев (4-6) магнитной пленки в отсутствие внешнего магнитного поля.

### **Глава 3. Поиск стабильных скирмионных решёток в основном состоянии в наноплёнке мультиферроика и изучение фазового параметрического пространства топологических зарядов с помощью искусственных нейронных сетей**

Искусственные нейронные сети или ИНС – мощный математический инструмент, в основе своей позволяющий аппроксимировать произвольную (векторную) функцию по известным точкам с любой требуемой точностью. В нашем случае такой функцией являются спиново-дипольные конфигурации изучаемой модели трехслойной плёнки композитного мультиферроика с треугольной решёткой, а аргумент функции – определяющие эти конфигурации константы взаимодействия.

В данной главе исследованы области стабильности идеальной скирмионной структуры при наличии трех различных обменных взаимодействий, внешнего магнитного поля, а также проведён поиск основных состояний в упрощённой модели с параллельным и перпендикулярным магнитоэлектрическим взаимодействием Дзялошинского-Мория и построена фазовая диаграмма топологического заряда скирмионов в координатах «обменное взаимодействие»-«магнитоэлектрическое взаимодействие», при помощи нового вычислительного подхода, комбинирующего метод градиентного спуска и эффективность машинного обучения для хранения уже известных состояний и аппроксимации неизвестных состояний в качестве первого приближения для градиентного спуска.

Основные результаты главы опубликованы в статьях и трудах конференций [117, 118, 119, 120, 121, 122].

## §1. Искусственная нейронная сеть

Искусственная нейронная сеть или ИНС — это универсальная аппроксимирующая функция «черный ящик», эмулирующая биологические нейронные структуры, которая позволяет нам предсказывать основное состояние для конкретных параметров без прямого вычисления минимальной энергии системы. Прежде чем использовать его, нам нужно подготовить обучающую выборку данных, вычислив основные состояния для случайно сгенерированных параметров (в пределах области  $[-1, 1]$  для каждого параметра). Каждый элемент обучающих данных состоит из пары векторов: входного (физические параметры) и выходного (основное состояние в виде проекций магнитных спинов и одномерных векторов поляризации). Мы «обучаем» ИНС на этих данных, причем обучение представляет собой процесс алгоритмического поиска внутренних параметров ИНС, таких, чтобы ошибка между результатом применения ИНС на входе и на выходе была минимизирована. Огромное преимущество использования ИНС для поиска в многомерном параметрическом пространстве (в нашем случае 8) заключается в том, что он оценивает выходные данные намного быстрее, чем любой метод оптимизации, давая правильные прогнозы для известных входных данных и аппроксимируя неизвестные, тем самым предлагая эффективное решение задачи. обратная задача поиска параметров, соответствующих некоторым нетривиальным конфигурациям основного состояния, отсутствовавшим в обучающих данных.

ИНС принимает массив в качестве входных данных (также называемый «входным сигналом») и обрабатывает его определенным образом, чтобы получить выходной массив (или «выходной сигнал»). ИНС обучается с использованием обучающих данных, комбинации «входной сигнал» + «выходной сигнал» произвольной размерности. В нашем случае входной сигнал представляет собой вектор значений параметров  $L_{in} = 8$ , выходной

сигнал содержит 9 векторов спина (выраженных в виде сферических углов  $\theta, \varphi$ ) и 2 слоя из 9 ферроэлектрических скаляров с общим количеством  $L_{out} = 36$  компонент. ИНС состоит из 3 или более «слоев»: входного, выходного и одного или нескольких «скрытых» слоев, которые организованы последовательно (рис. 3.1.). Каждый уровень получает сигнал от предыдущего уровня, обрабатывает его и передает на следующий уровень. Обработка обычно состоит из применения линейного преобразования  $\widehat{W}$ , смещения на некоторый вектор «смещения»  $\vec{B}$  и применения к результату нелинейной функции «активации»  $\sigma$  [77].

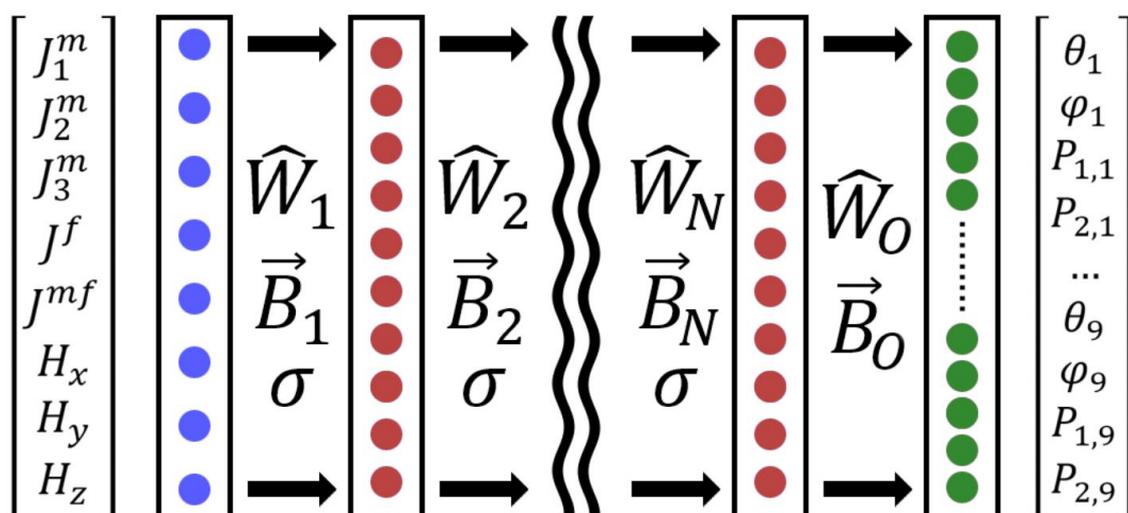


Рис. 3.1. Структура ИНС. Входной слой отмечен синим цветом, скрытые слои — красным, а выходной слой — зеленым.

Если слой  $i$  получает сигнал  $\vec{a}_{i-1}$  он передаст сигнал  $\vec{a}_i$  на слой  $(i+1)$ , определяемый следующим образом:

$$\vec{a}_i = \sigma(\widehat{W}_i \vec{a}_{i-1} + \vec{B}_i) \quad (3.1)$$

Размеры весовых и диагональных массивов соответствуют количеству составляющих («узлов») или «ширине» каждого слоя. Множество элементов  $\{\widehat{W}_i, \vec{B}_i\}$  являются внутренними параметрами ИНС, которые необходимо обучить, т.е. изменить таким образом, чтобы минимизировать ошибку прогнозов ИНС для данных обучающих данных.

Обучение ИНС основано на методе градиентного спуска, в котором ИНС рассматривается как вложенная функция с входным сигналом  $X$  и внутренними параметрами, подлежащими обучению,  $\hat{\Theta} = \{\hat{W}_i, \hat{B}_i\}$  в качестве аргументов и выходным сигналом  $F$  в качестве его значения  $F = F(\Theta, X)$ . «Функция ошибки»  $C$  ИНС обычно рассчитывается как стандартное отклонение предсказанного сигнала  $F$  от ожидаемого результата  $Y$ :  $= \|F - Y\|_2$ . Зависимость  $F$  от внутренних параметров  $\hat{\Theta}$  известна (3.1), поэтому мы можем вычислить градиент функции ошибки:  $\vec{\nabla}C = \partial C / \partial \hat{\Theta}_k$ , таким образом, изменение  $\hat{\Theta}$  в направлении, противоположном направлению градиента, уменьшит функцию ошибки:

$$\hat{\Theta}^{t+1} = \hat{\Theta}^t - \eta \vec{\nabla}C \quad (3.2)$$

Формула (3.2) отражает один шаг обучения ИНС, где параметр  $\eta > 0$  — «скорость обучения». При большом значении  $\eta$  функция ошибки колеблется вокруг минимума, а очень малая скорость обучения гарантирует медленное и плавное приближение к локальному минимуму, который может не совпадать с глобальным, поэтому нахождение оптимального значения для конкретных обучающих данных требует некоторой тонкой настройки при обучении.

## §2. Стабильность идеальной скирмионной решётки

### 2.1. Модель с дальнедействующим обменом

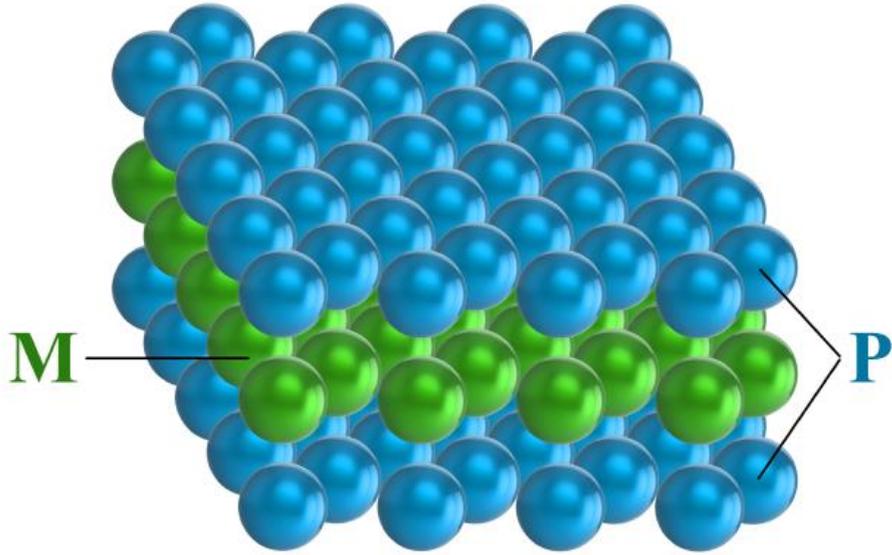


Рис. 3.2. Трёхслойная плёнка композитного мультиферроика

Определим гамильтониан моделируемого мультиферроика следующим образом:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1,9} \left[ \vec{S}_i \cdot \left( J_m^1 \sum_{j1=1,6} \vec{S}_{j1} + J_m^2 \sum_{j2=1,6} \vec{S}_{j2} + J_m^3 \sum_{j3=1,6} \vec{S}_{j3} + \vec{H} \right) + \sum_{k=1,2} P_i^k \cdot \sum_{j1=1,6} (J_f P_{j1}^k + J_{mf} [\vec{S}_i \times \vec{S}_{j1}]) \right] \quad (3.3)$$

Здесь  $J_m$ ,  $J_f$ ,  $J_{mf}$  – параметры антиферромагнитного обмена, ферроэлектрического и магнитоэлектрического взаимодействия Дзялошинского-Мория,  $\vec{S}_i$  – магнитный спин,  $P_i^k$  – электрический диполь на слое  $k$ ,  $\vec{H}$  – внешнее магнитное поле. Будем считать, что обе системы имеют гексагональную кристаллическую симметрию, и рассмотрим три обменных взаимодействия в магнитной подсистеме:  $J_m^1$ ,  $J_m^2$ ,  $J_m^3$  (Рис. 3.3).

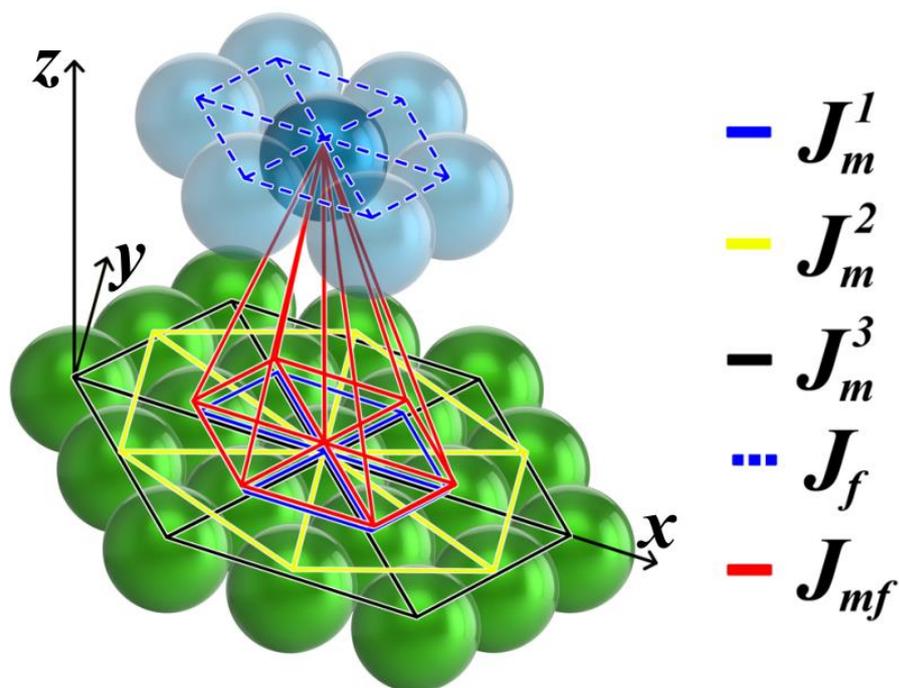


Рис. 3.3. Схема взаимодействия на интерфейсе плёнки.

Основное состояние магнитной подсистемы определяется минимумом энергии, описанным в гамильтониане (3.3). Наша задача состоит в том, чтобы найти такие комбинации параметров, при которых в основном состоянии возникают нетривиальные устойчивые скирмионоподобные топологические структуры (пример такой структуры показан на Рис. 3.4.).

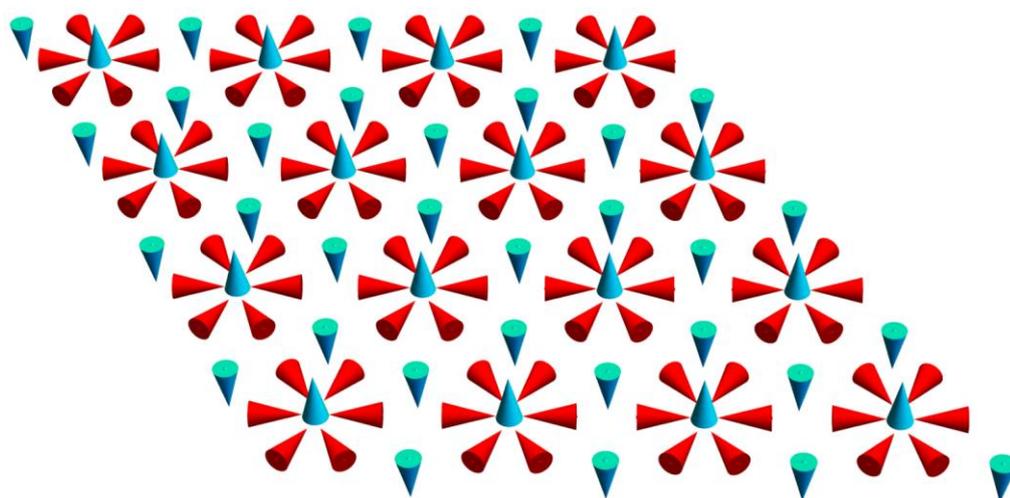


Рис. 3.4. Пример идеальной скирмионной решётки.

Поиск глобального минимума функции энергии с большим числом переменных ( $4N^2$  компонент единичных магнитных спинов в центральном магнитном слое и  $4N^2$  одномерных векторов электрической поляризации в двух внешних ферроэлектрических пленках, где  $N$  — линейная размером с квадратную наноплёнку) является чрезвычайно ресурсоемкой задачей. Для данного исследования мультиферроидной нанопленки с гексагональной симметрией и тремя параметрами обменного взаимодействия мы рассмотрим систему из 400 ячеек, каждая из которых содержит только 9 спинов и два слоя по 9 локальных векторов электрической поляризации, применяя периодические граничные условия в плоскости. Это количество переменных ячейки довольно мало, но оно позволяет всем узлам взаимодействовать друг с другом через разные диапазоны, обеспечивая при этом актуальную информацию об основных состояниях и быстрый поиск в параметрическом пространстве. В данной главе рассматривается трехслойная мультиферроидная пленка, каждый магнитный слой которой связан антиферромагнитно в плоскости и антиферромагнитно как с расположенным сверху, так и снизу с немагнитным слоем. Трехслойная мультиферроидная пленка представляет собой квадрат размером  $180 \times 180$  нм, состоящий из 400 ячеек. Эти размеры были выбраны для представления типичных размеров решетки многослойных систем, которые, как показано в литературе, содержат скирмионы [10, 12, 13]. Это количество переменных довольно мало, но оно позволяет всем узлам взаимодействовать друг с другом в разных диапазонах, обеспечивая при этом релевантную информацию об основных состояниях и быстрый поиск в параметрическом пространстве.

## 2.2. Результаты применения искусственной нейронной сети

Зададим начальную магнитную конфигурацию в виде, показанном на рис. 3.4., начальные значения для ферроэлектрических слоев в виде электрически неполяризованных слоёв:  $P_{11}, P_{12}, \dots, P_{19}, P_{29} = 0$ , и обозначим эти начальные состояния как  $SP_0$ . Поиск устойчивых решений начнем с генерации случайных наборов параметров  $A_i = \{J_m^1, J_m^2, J_m^3, J_f, J_{mf}, H^x, H^y, H^z\}$  в диапазоне  $[-1, 1]$  и минимизации полной энергии  $\mathcal{H}(A_i, SP_0)$ , определяемой (3.3) методом градиентного спуска с  $SP_0$  в качестве первого приближения. Следует отметить, что полученные решения  $SP_i$  устойчивы, но не обязательно являются основными состояниями мультиферроика для параметров  $A_i$ , т.е. локальный минимум, в который переходит исходная конфигурация  $SP_0$ . Мы сгенерировали в общей сложности  $2^8$  различных решений  $\{A_i, SP_i\}$  в качестве обучающих данных для ИНС. Затем выбираем такой  $SP_i$ , который имеет минимальную евклидову норму с начальным состоянием  $SP_0$ :  $M_0 = \|SP_i - SP_0\|_2$  и выбираем соответствующие параметры в качестве  $A_0$ . Это позволяет нам стохастически искать устойчивые состояния, близкие к  $SP_0$  в параметрическом пространстве, одновременно переобучая ИНС в соответствии со следующим алгоритмом:

1. Сгенерировать наборы параметров  $\{A_i\}$  как небольшие случайные модификации  $A_0$ , примените ИНС к  $\{A_i\}$  и вычислите евклидову норму между выходным сигналом и целевым состоянием  $\{M_i\} = \|F(\{A_i\}) - SP_0\|_2$ ;
2. Выбрать минимальное  $M'_i$ , вычислить стабильное состояние  $SP'_i$  для соответствующего методом градиентного спуска
3. Добавить  $\{A'_i, SP'_i\}$  к обучающим данным и переобучить ИНС;
4. Вычислить норму  $M'_0 = \|SP'_i - SP_0\|_2$  и сравнить с  $M_0$ : если  $M'_0 < M_0$  то новое состояние ближе к целевому состоянию,  $M_0 \rightarrow M'_0$ ,  $A_0 \rightarrow A'_0$ . В противном случае продолжить с предыдущим набором  $A_0$ .

Этот алгоритм обеспечивает быстрый поиск определенных устойчивых состояний в параметрическом пространстве, так как каждый новый элемент обучающих данных повышает точность предсказания ИНС, что, в свою очередь, повышает точность поиска, сужая области значений искомых параметров. Пример наиболее близкой к исходной конфигурации показан на Рис. 3.5.

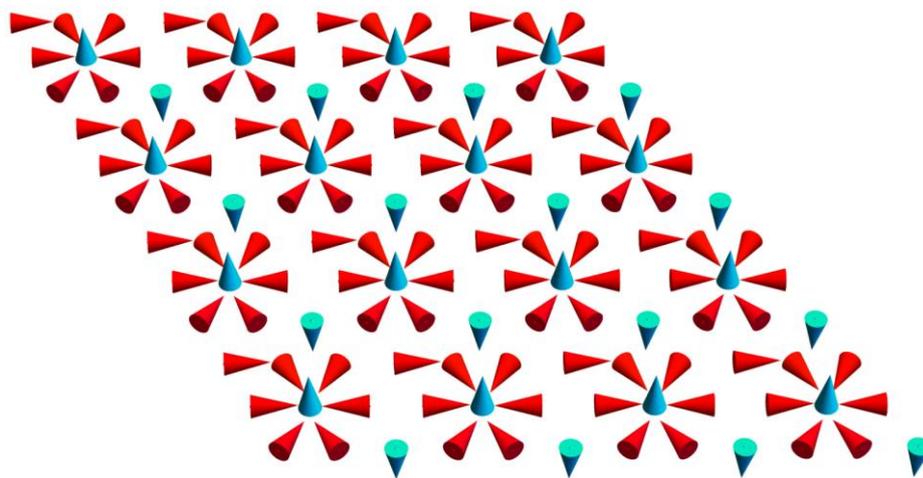


Рис. 3.5. Стабильная конфигурация магнитного слоя при  $J_m^1 = -0.93$ ,  $J_m^2 = -1.0$ ,  $J_m^3 = -0.59$ ,  $J_f = -0.97$ ,  $J_{mf} = 0.14$ ,  $H^x = H^y = 0$ ,  $H^z = 0.3$ , обнаруженная с помощью нейронной сети.

Этот модифицированный с помощью ИНС поиск позволил нам определить диапазоны значений параметров (Таблица 3.1), которые соответствуют стабильным магнитным состояниям со скирмионной решеткой. Всего в рамках этого исследования на локальную устойчивость было проверено  $\sim 2^{12}$  конфигураций и соответственно сгенерировано столько же элементов обучающей выборки.

С увеличением величины интерфейсной связи  $J_{mf}$  спины образуют в плоскости магнитного слоя магнитный вихрь - скирмион Неелевского типа. Типичный пример (увеличение двух скирмионов) полученных состояний показан на Рис. 3.6. Результаты для радиуса скирмионов показаны на Рис. 3.7. в зависимости от интерфейсной связи  $J_{mf}$ . Видно, что радиус скирмионов увеличивается, когда мы увеличиваем значения  $J_{mf}$ . В области

магнитоэлектрического взаимодействия  $J_{mf} \in (-0,7; 0)$  радиус скирмионов увеличивается до 3 узлов решётки при  $J_{mf} = -0,45$ , а при  $J_{mf} \in (0; 1,9)$  радиус скирмионов стремится к 6 узлов решетки, а затем размер скирмионов уменьшается до нуля.

Таблица 1. Значения параметров, соответствующих стабильным скирмионным решеткам.

Параметр	Мин. значение	Макс. значение
$J_m^1$	-1.01	-0.903
$J_m^2$	-9.975	-0.954
$J_m^3$	-1.055	1.005
$J_f$	-1.007	-0.802
$J_{mf}$	-0.725	1.887
$H_x$	-0.5	0.5
$H_y$	-0.5	0.5
$H_z$	-1.0	1.0

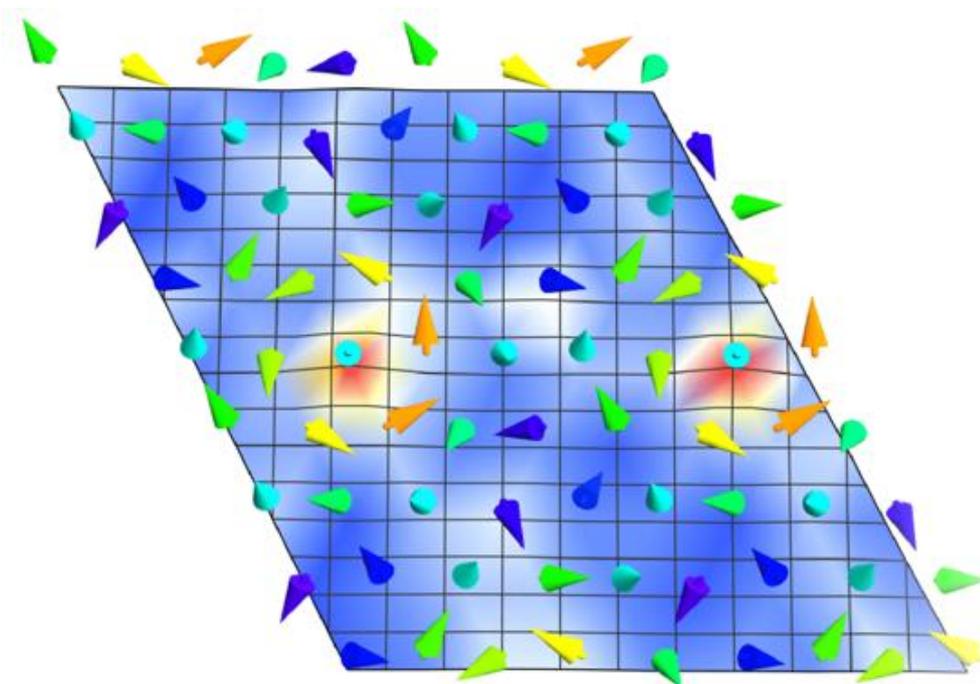


Рис. 3.6. Стабильное состояние с двумя скирмионами при  $J_m^1 = -0.93$ ,  $J_m^2 = -1.0$ ,  $J_m^3 = -0.59$ ,  $J_f = -0.97$ ,  $J_{mf} = 1.14$ ,  $H^z = 0.3$ .

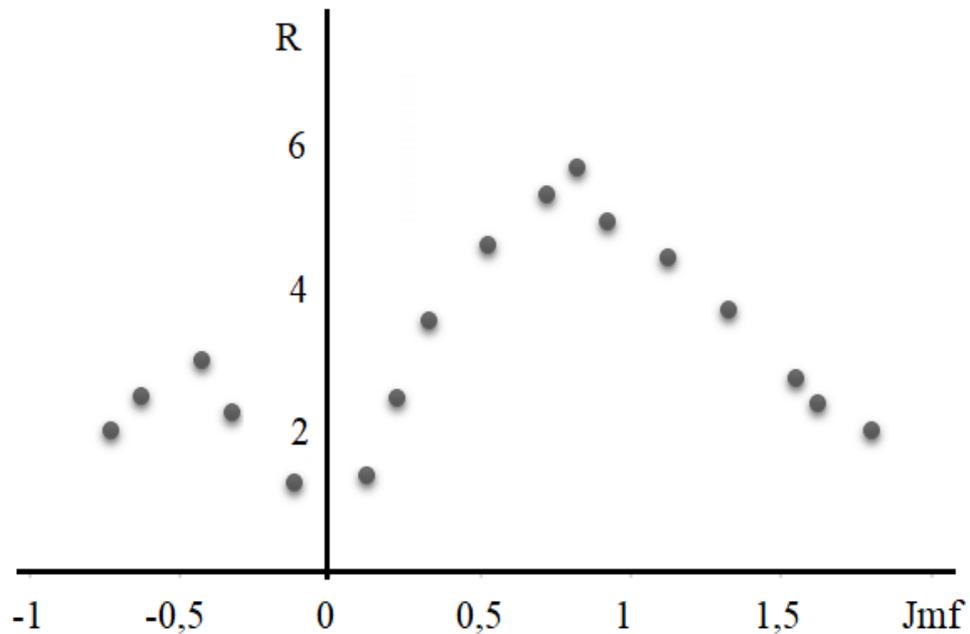


Рис. 3.7. Радиусы скирмионов в зависимости от величины  $J_{mf}$ . Здесь  $J_m^1 = -0.93$ ,  $J_m^2 = -1.0$ ,  $J_m^3 = -0.59$ ,  $J_f = -0.97$ ,  $H^z = 0.3$ .

Отметим, что параметры обмена  $J_m^1$  и  $J_m^2$  ближайших и вторых ближайших соседей отрицательны, что приводит к фрустрации в магнитном слое, а отрицательные значения  $J_f$  определяют антиферроэлектрический порядок. Также стоит отметить, что диапазон стабильных значений  $J_m^2$  намного шире, чем у других параметров, что говорит о слабой зависимости устойчивости от него. Взаимодействие третьих ближайших соседей  $J_m^3$  не оказывает существенного влияния на результаты, поэтому им и другими параметрами обмена можно пренебречь.

### §3. Фазовая диаграмма топологического заряда скирмионов в основном состоянии.

#### 3.1. Упрощённая модель с параллельным ДМ-взаимодействием.

В предыдущем параграфе мы изучали стабильность искусственно заданной идеальной скирмионной решётки в модели с большим количеством свободных параметров. Однако если стабильность конфигурации означает лишь то, что энергия этой конфигурации локально минимальна. Глобальный минимум энергии соответствует основному состоянию системы (ОС), и при этом его нахождение требует значительно больших вычислительных ресурсов. В связи с этим, в этом параграфе мы сконцентрируемся на исследовании основного состояния композитной плёнки мультиферроика с треугольной решёткой в зависимости от 2 параметров, а именно обменном магнитном  $J^m$  и магнитоэлектрическом  $J^{mf}$ . Магнитоэлектрическое взаимодействие выберем в виде Дзялошинского-Мория в параллельной форме. Слагаемое, отвечающее за ферроэлектрическое взаимодействие, также будет учтено в гамильтониане, однако для простоты мы зададим  $J^f = 1$ :

$$\sum_{i,j} \left\{ J^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J^{mf} \sum_{k=1,2} \vec{D}_{i,k} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] + \sum_{k=1,2} P_i^k \cdot P_j^k \right\} \quad (3.4)$$

$$\vec{D}_{i,k} = J^{mf} P_i^k (\vec{e}_x, \vec{e}_y, 0) \quad (3.5)$$

Здесь  $\vec{D}_{i,k}$  – вектор Дзялошинского-Мория (Рис. 3.8.), который мы выбрали пропорциональным диполю  $P_i^k$  и направленным по оси  $(1,1,0)$  – такой ДМ-вектор неколлинеарен ни одной из трёх выделенных осей плоской треугольной решётки  $(1,0,0), (1/2, \pm \sqrt{3}/2, 0)$ .

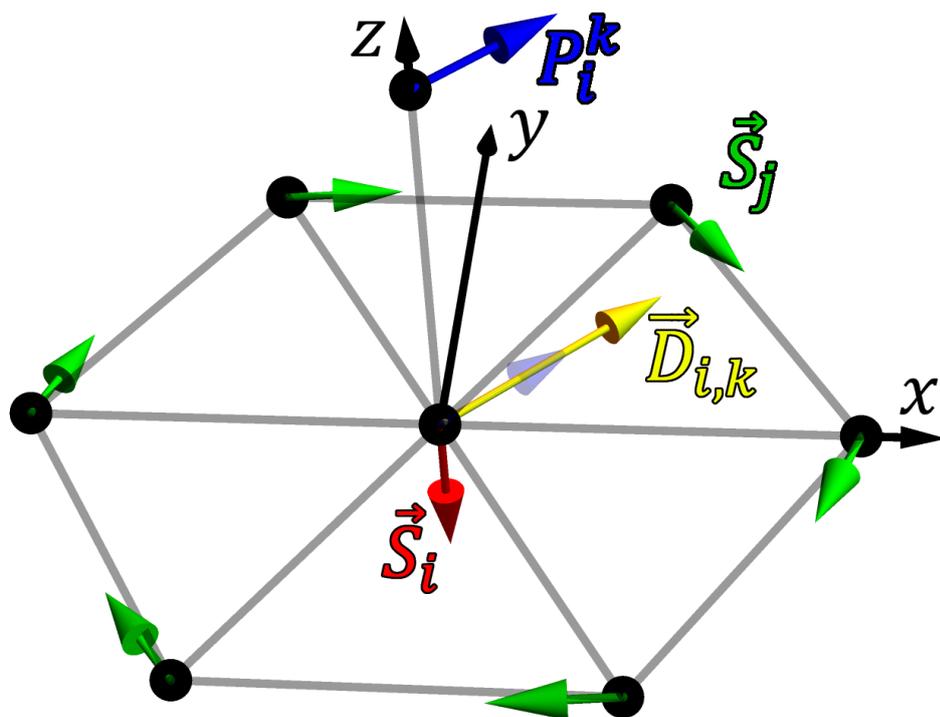


Рис. 3.8. Вектор Дзялошинского-Мория, неколлинеарный осям треугольной решетки.

### 3.2. Вычисление топологического заряда на треугольной решётке

Любому магнитному скирмиону можно сопоставить некоторую скалярную величину, называемую топологическим зарядом  $Q_T$  [65]:

$$Q_T = \iint_{R^2} \mu_Q(x, y) dx dy \quad (3.6)$$

$$\mu_Q = \vec{M} \cdot \left[ \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial y} \right] \quad (3.7)$$

Здесь  $\vec{M} = \vec{M}(x, y)$  – распределение намагниченности на плоскости,  $\mu_Q$  – плотность топологического заряда, а интегрирование проводится по всей плоскости по умолчанию.

Для нахождения плотности заряда в дискретной треугольной решетке спинов  $\vec{S}_{ij}$  сначала аппроксимируем пространственные производные  $\frac{\partial}{\partial x}$  и  $\frac{\partial}{\partial y}$

конечными разностями  $\frac{\Delta^i}{\Delta x}$  и  $\frac{\Delta^j}{\Delta y}$  (Рис. 3.9.):

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{S}_{ij}}{\partial x} \approx \frac{\Delta^i \vec{S}_{ij}}{\Delta x} = \frac{\vec{S}_{i+1j} - \vec{S}_{i-1j}}{2} \\ \frac{\partial \vec{S}_{ij}}{\partial y} \approx \frac{\Delta^j \vec{S}_{ij}}{\Delta y} = \frac{\vec{S}_{i-1j+2} - \vec{S}_{i+1j-2}}{2\sqrt{3}} \end{cases} \quad (3.8)$$

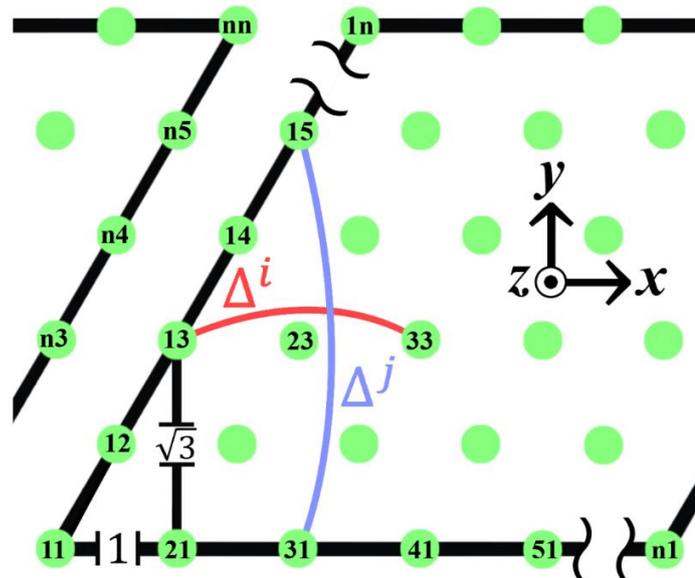


Рис. 3.9. Конечные разности в треугольной решётке.

Применим (3.8) к (3.7) и получим для плотности  $\mu_Q(x, y)$ :

$$\mu_{ij} = \frac{\vec{S}_{ij}}{4\sqrt{3}} \cdot [(\vec{S}_{i+1j} - \vec{S}_{i-1j}) \times (\vec{S}_{i-1j+2} - \vec{S}_{i+1j-2})] \quad (3.9)$$

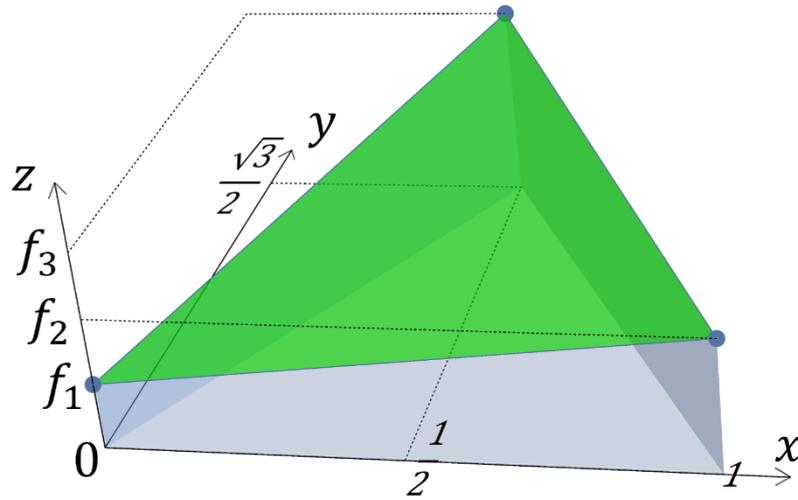


Рис. 3.10. Плотность заряда в равностороннем треугольнике решётки, аппроксимированная линейной функцией. Объём серой области равен топологическому заряду внутри треугольника.

Далее воспользуемся этими значениями плотности заряда на узлах решетки и симметрией треугольной решетки для интегрирования по всей плоскости  $XY$  (Рис. 3.10.). Для этого разобьем решетку на равносторонние треугольники и, чтобы различать реальную плотность  $\mu_Q(x, y)$  от аппроксимации обозначим вторую как  $f(x, y)$ , и будем считать её линейной  $f(x, y) = ax + by + c$  и равной  $\mu_{ij}$  в вершинах треугольника. Без потери общности будем считать координаты вершин всех треугольников равными:

$$\begin{cases} x_1 = 0 & x_2 = 1 & x_3 = 1/2 \\ y_1 = 0 & y_2 = 0 & y_3 = \sqrt{3}/2 \end{cases} \quad (3.10)$$

Теперь можно найти параметры функции  $a$ ,  $b$  и  $c$ :

$$\begin{cases} f_1 = f(0,0) = c \\ f_2 = f(1,0) = a + c \\ f_3 = f\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{a}{2} + \frac{b\sqrt{3}}{2} + c \end{cases}$$

$$\begin{cases} a = f_2 - f_1 \\ b = \frac{2f_3 - (f_1 + f_2)}{\sqrt{3}} \\ c = f_1 \end{cases} \quad (3.11)$$

Теперь всё готово для интегрирования:

$$\begin{aligned} Q_T &= \int_0^1 \left[ \int_0^{\sqrt{3}x} (ax + by + c) dy \right] dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 \left[ \int_0^{\sqrt{3}(1-x)} (ax + by + c) dy \right] dx = \\ &= \int_0^{1/2} \left[ (ax + c)y + \frac{by^2}{2} \Big|_{y=0}^{y=\sqrt{3}x} \right] dx + \int_{1/2}^1 \left[ (ax + c)y + \frac{by^2}{2} \Big|_{y=0}^{y=\sqrt{3}(1-x)} \right] dx = \\ &= \int_0^{\frac{1}{2}} \left[ \left( a\sqrt{3} + \frac{3b}{2} \right) x^2 + c\sqrt{3}x \right] dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 \left[ \left( \frac{3b}{2} - a\sqrt{3} \right) x^2 + (a\sqrt{3} - c\sqrt{3} - 3b)x + \right. \\ &\quad \left. + \left( c\sqrt{3} + \frac{3b}{2} \right) \right] dx = \frac{\sqrt{3}}{8} a + \frac{1}{8} b + \frac{\sqrt{3}}{4} c = \frac{\sqrt{3}}{12} (f_1 + f_2 + f_3) \end{aligned}$$

$$Q_T = \frac{\sqrt{3}}{12} (f_1 + f_2 + f_3) \quad (3.12)$$

Как и ожидалось, величина  $Q_T$  оказалась пропорциональной среднему трех значений плотности в вершинах треугольника. При такой схеме вычисления нам известны значения в средних точках треугольников, но таких точек вдвое больше, чем узлов треугольной решётки, поэтому для нахождения зарядов в самих узлах необходимо усреднить значения шести ближайших средних точек. Обозначим две средние точки севернее и северо-восточнее (где север соответствует оси  $Oy$ ) от узла  $(ij)$  как  $Q_T^{ij1} + Q_T^{ij2}$  соответственно. Тогда  $Q_T^{ij}$  определяется выражением (Рис. 3.11):

$$Q_T^{ij} = \frac{1}{6} \left( Q_T^{(i-1)j2} + Q_T^{ij1} + Q_T^{ij2} + Q_T^{(i+1)(j-1)1} + Q_T^{i(j-1)2} + Q_T^{i(j-1)1} \right) \quad (3.13)$$

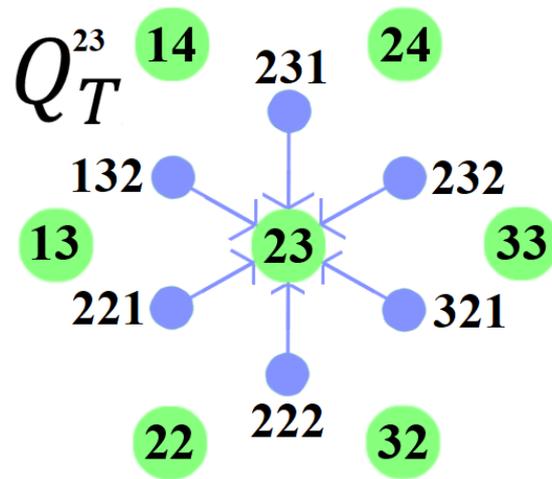


Рис. 3.11. Топологический заряд на узле (23).

### 3.3. Построение фазовой диаграммы топологического заряда в параметрическом пространстве $(J^m, J^{mf})$ .

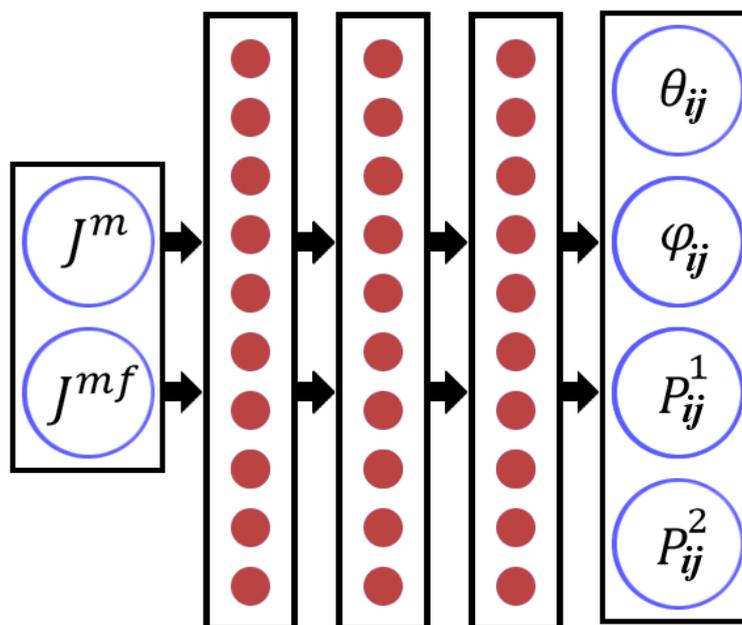


Рис. 3.12. ИНС для упрощённой модели с двумя входными параметрами.

Методика применения ИНС для данного исследования аналогична предыдущему. Мы моделируем скошенную квадратную плёнку (Рис. 3.9.), состоящую из  $9 \times 9$  узлов. Каждый узел содержит два значения диполей из внешних ферроэлектрических слоёв  $P_{ij}^1, P_{ij}^2$  и два компонента спина магнитного слоя  $\vartheta_{ij}, \varphi_{ij}$ , таким образом количество независимых переменных, а значит и размер выходного слоя ИНС, составляет 324.

Алгоритм работы заключался в следующих шагах:

1. Задать значения  $J^m, J^{mf}$ ;
2. Получить первое приближение решения с помощью ИНС;
3. Вычислить локальный минимум методом градиентного спуска;
4. Случайно задать 4 новых значения переменных для узла и для каждого случая вычислить локальные минимумы. Выбрать и присвоить к конфигурации значения, соответствующие наименьшей энергии;
5. Повторять пункт 4 для разных узлов плёнки до достижения глобального минимума энергии системы;

6. Добавить параметры  $J^m$ ,  $J^{mf}$  и полученное ОС к обучающей выборке и переобучить ИНС.

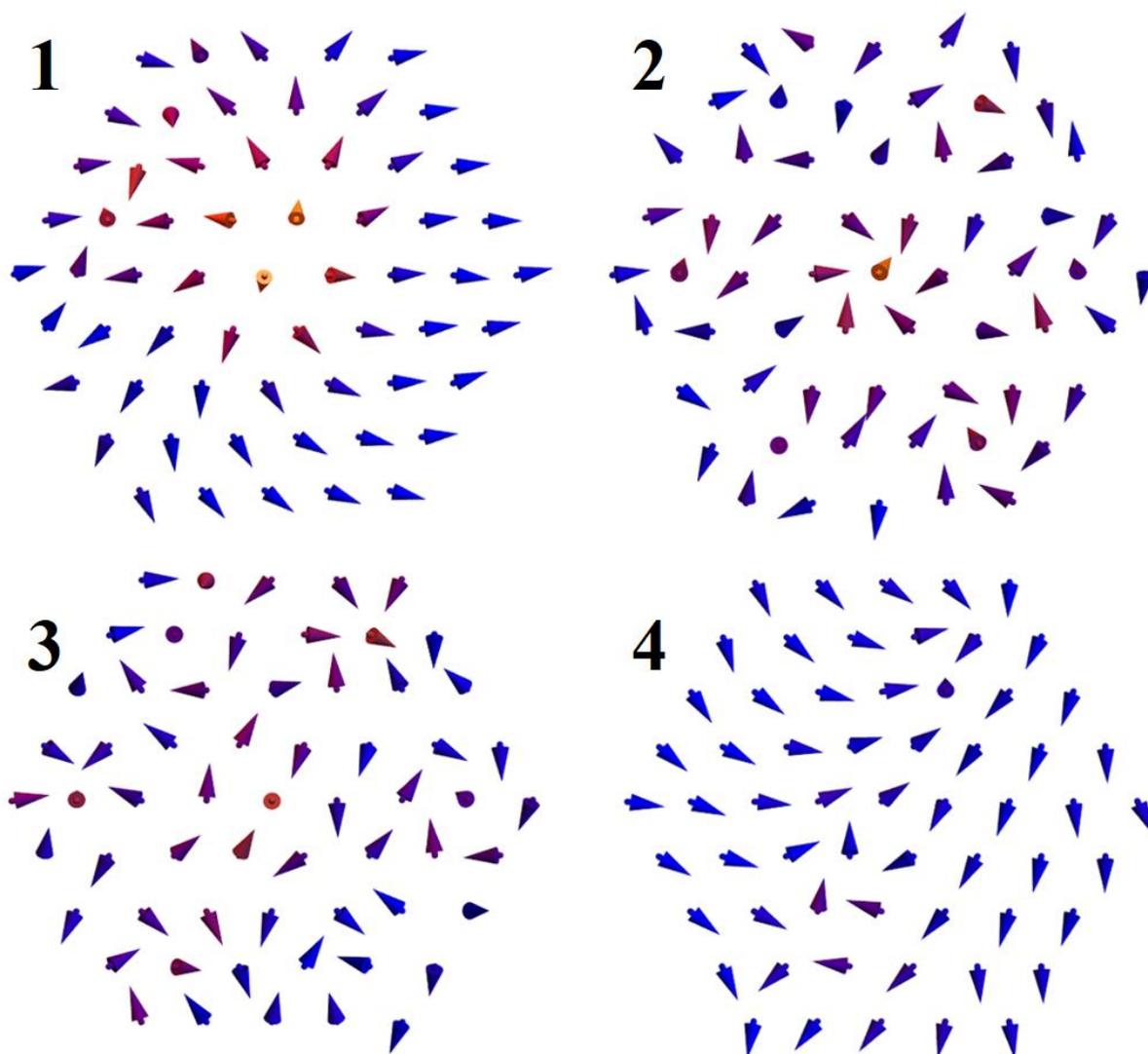


Рис. 3.13. Примеры основных состояний с различными значениями топологического заряда. Каждый рисунок соответствует наибольшему заряду в фазе. Цвета спинов отражают амплитуды локальных топологических зарядов.

При описанном подходе решение системы 324 связанных нелинейных уравнений сопряжено с большими вычислительными ресурсами даже при наличии очень хорошего первого приближения, обеспечиваемого с помощью переобучаемой ИНС, поэтому было изучено 441 точек плоскости  $(J^m, J^{mf})$  в диапазоне  $[-1,1]$  с шагом 0.1 (а в некоторых случаях с шагом 0.005, см. Рис.

3.15). В результате исследования топологических зарядов в этих точках было обнаружено 4 четко различимые фазы (Рис. 3.13.), две из которых обладают высокими значениями заряда, но при этом разной топологией скирмионов.

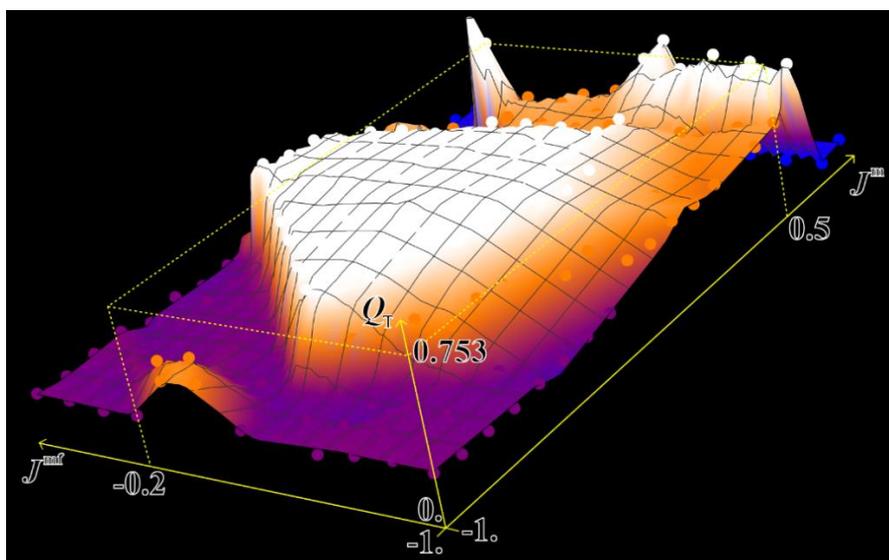
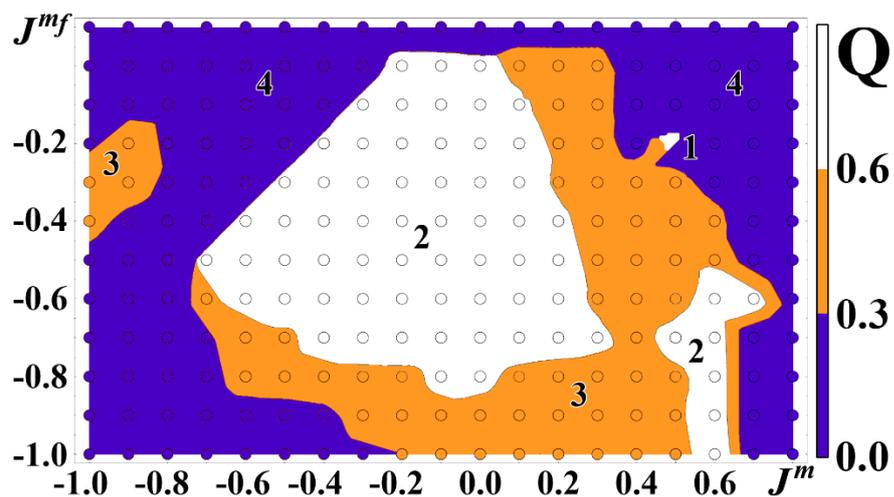


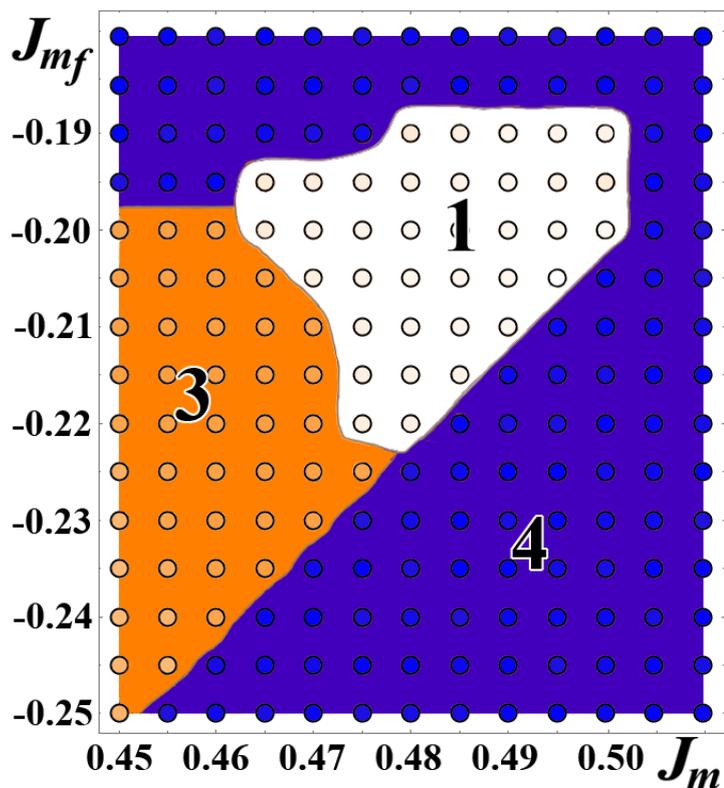
Рис. 3.14. 3D вид фазовой диаграммы топологического заряда в координатах  $(J^m, J^{mf})$ . Точки соответствуют точным значениям, поверхность аппроксимирована с помощью ИНС. Жёлтые линии указывают на максимальное значение заряда.

Полученная фазовая диаграмма представлена на Рис. 3.14 (в 3D) и Рис. 3.15. (в 2D). Ниже перечислено несколько наблюдений относительно диаграммы:

1. Фаза 1 содержит наибольшие топологические заряды и неспиральные скирмионы, максимальное значение  $Q_T \approx 0.814$  в точке  $J^m = 0.5, J^{mf} = -0.2$ , значение которого претерпевает резкий скачок на границе с фазой 4, что может указывать на критический характер зависимости заряда от параметров.
2. Фаза 2 содержит спиральные скирмионы с зарядом  $Q_T \sim 0.6 \dots 0.7$ . Фаза состоит из двух областей, разделённых в точке  $J^m = 0.4, J^{mf} = -0.7$ .
3. Фазы 3 и 4 не содержат регулярных скирмионов, но фаза 3 имеет относительно высокий локальный топологический заряд ( $Q_T \sim 0.4$ ).



а)



б)

Рис. 3.15. а) Фазовая диаграмма топологического заряда в координатах  $(J^m, J^{mf})$ . Точки соответствуют точным значениям, фазы аппроксимированы с помощью ИНС. Области  $J^m > 0.8$  и  $J^{mf} > 0.1$  опущены ввиду низкой информативности. б) Фаза 1 в большем разрешении.

## Выводы к главе

С помощью ИНС мы построили взаимосвязь между комбинациями параметров мультиферроиков и соответствующими конфигурациями основного состояния, используя относительно небольшое количество предварительно вычисленных конфигураций в качестве обучающих данных. Применение ИНС позволило избежать чрезмерных вычислительных затрат при исследовании параметрического пространства и найти такие параметры, при которых возможно существование устойчивых нетривиальных конфигураций основного состояния в виде стабильного кристалла скирмиона.

Стабилизирующее воздействие на вихревые структуры может быть обеспечено за счет магнитоэлектрического взаимодействия с ферроэлектрическими слоями, значения которых линейно зависят от легкоуправляемого внешнего электрического поля. Заметим, что идеальная мультиферроидная ячейка памяти открывает возможность электрической записи магнитного состояния. Реализация таких устройств требует электрического управления магнитным параметром порядка.

Взаимодействие третьих ближайших соседей  $J_m^3$  не оказывает существенного влияния на результаты, поэтому им и более дальнедействующими параметрами обмена можно пренебречь. Отметим, что минимально необходимое значение  $J_m^2$  для стабилизации решетки скирмиона уменьшается с увеличением значения  $J_{mf}$ , поскольку  $J_m^2$  и  $J_m^1$  являются антиферромагнитными обменными взаимодействиями, которые конкурируют с магнитоэлектрической связью.

При различных комбинациях обменного взаимодействия и параллельного магнитоэлектрического ДМ-взаимодействия возможно существование скирмионов с различной топологией. Фаза с хиральными скирмионами представляет собой большую область в антиферромагнитной части фазового параметрического пространства  $(J^m, J^{mf})$ , а фаза с нехиральными скирмионами является узкой областью в ферроэлектрической

части пространства. При этом в области положительных значений магнитоэлектрического параметра скирмионы не образуются.

В ходе исследования фазового пространства было обнаружено, что границы скирмионных фаз являются чётко определёнными, при пересечении которых топологический заряд скирмионов претерпевает скачкообразное изменение. Другое наблюдение заключается в том, что внутри фаз изменение основного состояния происходит плавно, что подтверждает верность выбранного метода исследования на основе искусственных нейронных сетей, которые для максимальной эффективности требуют достаточной гладкости аппроксимируемой функции.

## 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.

Построена диаграмма зависимости топологического заряда скирмионов от интенсивностей основных параметров взаимодействия системы, в том числе обмена и взаимодействия Дзялошинского-Мории, и исследован вопрос о стабильности топологически защищенных структур по отношению к материальным параметрам.

Построены фазовые диаграммы в наноразмерных мультиферроиках с кубической симметрией, свидетельствующие о тесной взаимосвязи магнитных и ферроэлектрических фазовых переходов, имеющих различную природу значения температур переходов внутри пленок и на интерфейсе. Установлены критические значения параметров взаимодействия, при которых в системе наблюдается изменение типа фазового перехода.

Показано, что скирмионы в основном состоянии в магнитоэлектрических сверхрешетках с треугольной симметрией формируются в области значений параметра магнитоэлектрического взаимодействия  $J^{mf} \in [-1.0, -0.75]$  в отсутствие внешнего магнитного поля и распределяются в трехмерном пространстве ферромагнитного слоя. В магнитоэлектрических сверхрешетках с кубической симметрией такого эффекта не наблюдается. Толщина ферроэлектрической пленки магнитоэлектрической сверхрешетки не влияет на устойчивость скирмионной структуры и напротив, толщина магнитной пленки определяет стабильность скирмионной структуры: скирмионы формируются только для диапазона слоев (4-6) магнитной пленки в отсутствие внешнего

Предложен алгоритм на основе искусственных нейросетей, который обеспечивает быстрый поиск определенных устойчивых состояний в

параметрическом пространстве, при этом каждый новый элемент обучающих данных повышает точность предсказания ИНС. Определены диапазоны значений параметров, которые соответствуют стабильным основным состояниям со скирмионной решеткой.

В двуслойной пленке антиферромагнетик/ферроэлектрик с треугольной симметрией обнаружены четыре четко различимые фазы, две из которых обладают высокими значениями топологического заряда, но при этом отличаются топологией скирмионов. Границы скирмионных фаз являются четко определёнными, при пересечении которых топологический заряд скирмионов претерпевает скачкообразное изменение. Внутри фаз происходит плавное изменение основного состояния.

## Список литературы

1. Боголюбов Н.Н. Собрание научных трудов в 12-ти томах: Т.6. Статистическая механика – М.: Наука, 2006. – 520 с.
2. Боголюбов Н.Н. (мл.), Садовников Б.И. Некоторые вопросы статистической механики – М.: Высшая школа, 1975. – 352 с.
3. Боголюбов Н.Н. (мл.) Метод исследования модельных гамильтонианов – М.: Наука, 1975. – 352 с.
4. Хуанг К. Статистическая механика – М.: Мир, 1966. – 520 с.
5. Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М. Устойчивость и фазовые переходы – М.: Мир, 1973. – 383 с.
6. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. – М.: Мир, 1973. – 425 с.
7. Садовников Б.И., Федянин В.К. Неравенства Н.Н. Боголюбова в системах взаимодействующих многих частиц с нарушенной симметрией // Теоретическая и математическая физика. – 1973. – Т. 16. – №. 3. – С. 368-393.
8. D.I. Khomskii, Multiferroics: different ways to combine magnetism and ferroelectricity, J. Magn. Magn. Mater. 306 (1) (2006) 1–8.
9. R. Ramesh, N.A. Spaldin, Multiferroics: progress and prospects in thin films, Nanosci. Technol. (2009) 20–28.
10. M. Bibes, A. Barthélémy, Multiferroics: towards a magnetoelectric memory, Nat. Mater. (2008).
11. A.P. Pyatakov, A.K. Zvezdin, Magnetoelectric and multiferroic media, PHYS-USP 55 (6) (2012) 557–581.
12. A. Scaramucci, H. Shinaoka, M.V. Mostovoy, M. Müller, C. Mudry, M. Troyer, N.A. Spaldin, Multiferroic magnetic spirals induced by random magnetic exchanges, Phys. Rev. X 8 (2018) 011005.
13. S.-W. Cheong, M.V. Mostovoy, (2007), Multiferroics: a magnetic twist for ferroelectricity, Nat. Mater. 6 (2007) 13–20.

14. D. Kuang, F. Yang, W. Jing, Z. Yang, Multiferroic properties of a YCrO<sub>3</sub>/BiFeO<sub>3</sub> bilayered thin film prepared by a sol-gel method, *Physica B* 530 (2018) (2018) 295–299.
15. J.K. Jochum, et al., (2018) Impact of magnetization and hyperfine field distribution on high magnetoelectric coupling strength in BaTiO<sub>3</sub>–BiFeO<sub>3</sub> multilayers, *Nanoscale* 10 (2018) 5574–5580.
16. I.V. Bychkov, D.A. Kuzmin, V.G. Shavrov, S. Lamekhov, Monte carlo modelling of two dimensional multiferroics, *Achievements in Magnetism, Vol. 233 of Solid State Phenomena*, Trans Tech Publications, 2015, pp. 379–382.
17. J. Wang, et al., Giant magnetoelectric effect at the graphone/ferroelectric interface, Article number: 12448, *Sci. Rep.* 8 (2018).
18. M. Staruch, J.F. Li, Y. Wang, D. Viehland, P. Finke, (2014), Giant magnetoelectric effect in nonlinear Metglas/PIN-PMN-PT multiferroic heterostructure, *Appl. Phys. Lett.* 105 (2014) 152902.
19. Sanjukta Paul, et al., Giant magnetoelectric effect in pure manganite-manganite heterostructures, *Phys. Rev. B* 96 (2017) 195130.
20. P.M. Leufke, R. Kruk, R.A. Brand, H. Hahn, In situ magnetometry studies of magnetoelectric lsmo/pzt heterostructures, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 094416.
21. J. Tominaga et al. (2015), Giant multiferroic effects in topological GeTe-Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> superlattices.
22. Irkhin, V. Y. (2002). A new mechanism of first-order magnetization in multisublattice rare-earth compounds. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(27), 6865.
23. M. Abid, H. Ouahmane, H. Lassri, A. Khmou, R.J. Krisnan, *Magn. Matter* 202 (1999) 335.
24. H. Ortiz-Alvares, C. Bedoya-Hincapie, E. Restrepo-Parra, Monte Carlo simulation of charge mediated magnetoelectricity in multiferroic bilayers, *Physica B: Condensed Matter* 454 (2014) 235–239.
25. V.V. Ryazanov, V.A. Oboznov, A.S. Prokofiev, V.V. Bolginov, A.K. Feofanov, *J. Low Temp. Phys.* 136 (2004) 285.

26. Rosh A (2017), “Spintronics: Electric control of skyrmions,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 12, pp. 103-104.
27. Fert A, Cros V, Sampaio J (2013), “Skyrmions on the track,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 8, pp. 152-156.
28. Koshibae W, Kaneko Y. et al. (2015), “Memory functions of magnetic skyrmions,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 54, p. 053001.
29. A. Feraoun, A. Zaim, M. Kerouad, *J. Magn. Magn. Mater.* 377 (2015) 126.
30. W. Liu, Z. Xin, X. Wang, Magnetic properties of a random diluted spin-1/2, 1, 3/2 superlattice, *Phys. Lett. A* 372 (7) (2008) 1114–1118.
31. W. Wang, F. Xue, M. Wang, Compensation behavior and magnetic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1/2, 1) Ising double layer superlattice, *Physica B* 515 (2017) 104–111.
32. P.N. Sun, L. Cui, T.Q. Lü, Condensed matter: electronic structure, electrical, magnetic, and optical properties: combined effect of the transition layer and interfacial coupling on the properties of ferroelectric bilayer film, *Chin. Phys. B* 18 (4) (2009) 1658–1664.
33. A.K. Yadav, et al., Observation of polar vortices in oxide superlattices, *Nature*, 530. (2016) 198–201.
34. E. Bousquet, et al., Improper ferroelectricity in perovskite oxide artificial superlattices, *Nature* 452 (2008) 732–736.
35. D. Sichuga, et al., (2010) Chiral patterns of tilting of oxygen octahedra in zerodimensional ferroelectrics and multiferroics: a first principle-based study, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 207603.
36. H.J. Zhao, et al., Atomistic theory of hybrid improper ferroelectricity in perovskites, *Phys. Rev. B* 89 (2014) 174101(R).
37. M.J. Pitcher, et al., Tilt engineering of spontaneous polarization and magnetization above 300K in a bulk layered perovskite, *Science* 347 (2015) 420–424.

38. J.K. Jochum, et al., Impact of magnetization and hyperfine field distribution on high magnetoelectric coupling strength in BaTiO<sub>3</sub>–BiFeO<sub>3</sub> multilayers, *Nanoscale* 10 (2018) 5574–5580.
39. N. Jedrecy, et al., Cross-Correlation between Strain, Ferroelectricity, and Ferromagnetism in Epitaxial Multiferroic CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/BaTiO<sub>3</sub> Heterostructures, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 10 (33) (2018) 28003–28014.
40. F. Zhang, et al., Increased Curie Temperature Induced by Orbital Ordering in La<sub>0.67</sub>Sr<sub>0.33</sub>MnO<sub>3</sub>/BaTiO<sub>3</sub> Superlattice, *Nanoscale Res. Lett.* 13 (2018).
41. J. Lee, et al., Interfacial magnetoelectric coupling in tricomponent superlattices, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 144425.
42. Zvezdin A.K., Pyatakov A.P. Phase transitions and the giant magnetoelectric effect in multiferroics // *Physics-Uspekhi*. – 2004. – V. 47. – №. 4. – p. 416.
43. Butenko A, Leonov A, Rößler U, Bogdanov A (2010), “Stabilization of skyrmion textures by uniaxial distortions in noncentrosymmetric cubic helimagnets,” *Physical Review B*, vol. 82, p. 052403.
44. El Hog S, Bailly-Reyre A, Diep H (2018), “Stability and phase transition of skyrmion crystals generated by Dzyaloshinskii-Moriya interaction,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 455, pp. 32-38.
45. Kurumaji T. et al. (2019) “Skyrmion lattice with a giant topological Hall effect in a frustrated triangular-lattice magne,” *Science*, vol. 365, pp. 914-918.
46. Raeliarijaona A. et al. (2020). “Skyrmions in TMD-based antiferromagnetic triangular lattices,” *Bulletin of the American Physical Society*, vol. 65, p. G42.00009.
47. Pei H et al. (2017) “The frustration-induced ferroelectricity of a manganite tricolor superlattice with artificially broken symmetry,” *Scientific reports*, vol. 7, pp.1-7.
48. Yadav A. et al. (2016) “Observation of polar vortices in oxide superlattices,” *Nature*, vol. 530, pp.198-201.

49. El Hog S, Kato F, Koibuchi H, Diep H (2020) “Skyrmions on 2D elastic surfaces with fixed boundary frame,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 498, p.166095.
50. Diep H T (2014), *Theory of magnetism: Application to surface physics*, Singapore: World Scientific Printers. doi: 10.1142/8994
51. Pyatakov A (2018) “Magnetoelectricity goes local: From bulk multiferroic crystals to ferroelectricity localized on magnetic topological textures,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 542, pp.59-62.
52. Kang W, Huang Y, Zhang X, Zhou Y, and Zhao W (2016), “Skyrmion-Electronics: An Overview and Outlook”, *Proceedings of the IEEE*, vol. 104, pp. 2040-2061.
53. Parkin S, Hayashi M, and Thomas L (2008), “Magnetic domain-wall racetrack memory,” *Science*, vol. 320, pp. 190–194.
54. Zhang X, Ezawa M, and Zhou Y (2015), “Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions,” *Scientific Reports*, vol. 5, p. 9400.
55. Zhou Y, Ezawa M (2014), “A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in junction geometry,” *Nature communications*, vol. 5, pp. 1-8.
56. Zhang X, Zhou Y, Ezawa M, Zhao G P, Zhao W (2015), “Magnetic skyrmion transistor: skyrmion motion in a voltage-gated nanotrack,” *Scientific reports*, vol. 5, p. 11369.
57. Zhang X. et al. Magnetic skyrmion transistor: skyrmion motion in a voltage-gated nanotrack //Scientific reports. – 2015. – V. 5. – №. 1. – p. 11369.
58. Shiota Y. et al. (2011) “Quantitative evaluation of voltage-induced magnetic anisotropy change by magnetoresistance measurement,” *Appl. Phys. Express*, vol. 4, p. 43005.
59. Huang Y, Kang W, Zhang X, Zhou Y., Weisheng Zhao W. (2017), “Magnetic skyrmion-based synaptic devices,” *Nanotechnology*, vol. 28, p.08LT02.
60. Li S, Kang W, Huang Y, Zhang X, Zhou Y, Zhao W (2017)., “Magnetic skyrmion- based artificial neuron device,” *Nanotechnology*, vol. 28, p. 31LT01.

61. Romming N. et al. (2013), "Writing and deleting single magnetic skyrmions," *Science*, vol. 341, pp. 636-639.
62. Pyatakov A. et al. (2011), "Magnetically switched electric polarity of domain walls in iron garnet films" *Europhys. Lett.*, vol. 93, p. 17001.
63. M. Nagao, Y. G. So, H. Yoshida, K. Yamaura, T. Nagai, T. Hara, A. Yamazaki, K. Kimoto. *Phys. Rev. B.* 92 (14), 140415 (2015).
64. X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, Y. Tokura. *Nature.* 465 (7300), 901904 (2010).
65. S. Heinze, K. V. Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer, S. Blugel. *Nat. Phys.* 7 (9), 713718 (2011).
66. N. Kanazawa, J. H. Kim, D. S. Inosov, J. S. White, N. Egetenmeyer, J. L. Gavilano, S. Ishiwata, Y. Onose, T. Arima, B. Keimer, Y. Tokura. *Phys. Rev. B.* 86 (13), 134425 (2012).
67. I. F. Sharafullin, M. K. Kharrasov, H. T. Diep. *Phys. Rev. B.* 99 (21), 214420 (2019).
68. R. A. Duine, K. J. Lee, S. S. Parkin, M. D. Stiles. *Nat. Phys.* 14 (3), 217 (2018).
69. X. Zhang, Y. Zhou, M. Ezawa. *Nat. Comm.* 7 (1), 1 (2016).
70. X. Zhang, M. Ezawa, Y. Zhou. *Phys. Rev. B.* 94 (6), 064406 (2016).
71. X. Y. Dong, F. Pollmann, X. F. Zhang. *Phys. Rev. B.* 99 (12), 121104 (2019).
72. Ferriani P. et al. (2008), "Atomic-Scale Spin Spiral with a Unique Rotational Sense: Mn Monolayer on W(001)," *Phys. Rev. Lett.* vol. 101, p. 027201.
73. Bode M. et al. (2007), "Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry," *Nature*, vol 447, pp. 190-193.
74. Szuszkiewicz W, Dynowska E, Witkowska B, Hennion B (2006), Spin-wave measurements on hexagonal MnTe of NiAs-type structure by inelastic neutron scattering, *Physical Review B*, vol. 73, p. 104403.
75. Magnin Y, Diep H T (2012), Monte Carlo study of magnetic resistivity in semiconducting MnTe, *Physical Review B*, vol. 85, p.184413.

76. Yahyaoui S, Kallel S, Diep H T (2006), Magnetic properties of perovskites  $\text{LaSrMn}_3+\text{Mn}_4+\text{TiO}$ : Monte Carlo simulation versus experiments, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 416, pp. 441–448.
77. K. Gurney. *An introduction to neural networks*. CRC press (2018).
78. Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, M. Imada. *Phys. Rev. B.* 96 (20), 205152 (2017).
79. H. Saito, M. Kato. *J. Phys. Soc. Jpn.* 87 (1), 014001 (2018).
80. S. J. Gershman, E. J. Horvitz, J. B. Tenenbaum. *Science.* 349 (6245), 273 (2015).
81. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko. *Phys. Rev. B.* 98 (17), 174411 (2018).
82. K. R. Safronov, V. O. Bessonov, A. A. Fedyanin. *JETP Lett.* 114 (6), 360 (2021).
83. D. Prychynenko, M. Sitte, K. Litzius, B. Kruger, G. Bourianoff, M. Klaui, J. Sinova, K. Everschor-Sitte. *Phys. Rev. Applied.* 9 (1), 014034 (2018).
84. X. Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W. Z. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui, Y. Tokura. *Nat. Mater.* 10 (2), 106 (2011).
85. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko. *Phys. Rev. B.* 99 (2), 024430 (2019).
86. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko. *Phys. Rev. B.* 97 (18), 184415 (2018).
87. J. Wang, W. Zhang, T. Hua, T. C. Wei. *Phys. Rev. Research.* 3 (1), 013074 (2021).
88. I. F. Sharafullin, H. T. Diep. *JETP Lett.* 114 (9), 579 (2021).
89. Qin, M. H., Wang, K. F., & Liu, J. M. (2009). Two-step magnetization in a spin-chain system on the triangular lattice: Wang-Landau simulation. *Physical Review B*, 79(17), 172405.
90. Hao, W. (2021). A gradient descent method for solving a system of nonlinear equations. *Applied Mathematics Letters*, 112, 106739.

91. Diep H T (2019), "Phase Transition in Frustrated Magnetic Thin Film-Physics at Phase Boundaries", *Entropy*, vol. 21, p.175.
92. Нугуманов А.Г. Корреляции магнитоэлектрических взаимодействий в антиферромагнитном мультиферроике // Тезисы докладов Межрегиональной школы-конференции «Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах», Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. С. 22.
93. Sharafullin I.F., Kharrasov M.Kh., Kyzыrgulov I.R., Nugumanov A.G. The correlations between dynamic interactions in antiferromagnetic multiferroics // *Book of Abstracts Moscow International Symposium on Magnetism «MISM-2014»*, М.: Printhouse.Leto, 2014. P.126.
94. Sharafullin I.F., Kyzыrgulov I.R., Nugumanov A.G. Dynamic Interactions in magnetic materials with strongly correlating subsystems // *Abstract Book International conference Piezoresponse Force Microscopy and Nanoscale Phenomena in Polar Materials «PFM-2014»*, Ekaterinburg, 2014. P. 111.
95. Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф. Магнитоэлектрическое взаимодействие в перовскитовых структурах в области магнитоакустического резонанса // Тезисы докладов VII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых учёных «Фундаментальная математика и её приложения в естествознании», Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. С. 23.
96. Kharrasov, M. K., Kyzыrgulov, I. R., Sharafullin, I. F., & Nugumanov, A. G. The correlations between dynamic interactions in antiferromagnetic multiferroics. // *Solid State Phenomena*. 233(1), pp. 383-387.
97. Нугуманов А.Г. Магнитные свойства и магнитоэлектрическое взаимодействие в наноплёнках мультиферроиков // *Материалы 53-й международной научной студенческой конференции «МНСК-2015»*, Новосибирск, 2015. С. 40.
98. Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф. Изучение динамических взаимодействий и критических явлений в наноплёнках мультиферроиков методами Монте-Карло // *Материалы Двадцать первой Всероссийской*

научной конференции студентов-физиков и молодых учёных «ВНКСФ-21», Омск, 2015. С. 155.

99. Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф. Динамические явления и влияние внешних полей в тонких пленках мультиферроиков в области фазовых переходов // Материалы XXII Международного молодёжного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2015», М: МАКС Пресс, 2015. С.49.

100. Кызыргулов И.Р., Харрасов М.Х., Шарафуллин И.Ф., Нугуманов А.Г. Фазовые переходы и критические явления в пленках мультиферроиков с орторомбической магнитной структурой // Proceedings of 18-th international meeting Order, Disorder and Properties of Oxides «ODPO-18», Rostov-on-Don – Loo, 2015. Vol. II. P. 131-132.

101. Нугуманов А.Г. Изучение динамических взаимодействий и критических явлений в наноплёнках мультиферроиков методами Монте-Карло // Тезисы докладов VIII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых учёных «Фундаментальная математика и её приложения в естествознании», Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. С. 20.

102. Кызыргулов И.Р., Харрасов М.Х., Шарафуллин И.Ф., Нугуманов А.Г. Теоретическое исследование динамики магнитоструктурных превращений, происходящих в мультиферроиках со структурой перовскита под действием внешнего магнитного и электрического полей // Proceedings of 18-th international meeting Ordering in Minerals and Alloys «ОМА-18», Rostov-on-Don – Loo, 2015. Vol. II. P. 180-181.

103. Шарафуллин И.Ф., Кызыргулов И.Р., Нугуманов А.Г. Фазовые переходы и критические явления в пленках мультиферроиков с орторомбической магнитной структурой // Тезисы докладов Международной конференции, посвящённой 80-летию члена-корреспондента РАН И.К. Камилова «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», Челябинск, 2015. С.116.

104. Kharrasov, M. K., Kuzrygulov, I. R., Sharafullin, I. F., & Nugumanov, A. G. (2016). Phase transitions and critical phenomena in multiferroic films with

orthorhombic magnetic structure. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 80(6), 695-697.

105. Харрасов, М. Х., Кызыргулов, И. Р., Шарафуллин, И. Ф., & Нугуманов, А. Г. (2016). Фазовые переходы и критические явления в пленках мультиферроиков с орторомбической магнитной структурой. Известия Российской академии наук. Серия физическая, 80(6), 695-697.

106. Mukhamed Kh. Kharrasov, Ilgiz R. Kuzyrgulov, Aidar G. Nugumanov. Magneto-electric interaction, phase transitions and critical phenomena for multiferroic thin film by Monte-Carlo simulation // VI Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism" (EASTMAG-2016): Abstracts. – Krasnoyarsk 15-19 August, Kirensky Institute of Physics, Russian Academy of Sciences, Siberian Branch – 582 p, p.51.

107. Нугуманов А.Г., Жармухаметов А.Р. Моделирование фазовых переходов в наноплёнках мультиферроиков методом Монте-Карло // Материалы Двадцать третьей Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-23, Екатеринбург): материалы конференции, тезисы докладов: В 1 т.Т.1 – Екатеринбург – Ростов на Дону: издательство АСФ России, 2017, с.91.

108. Nugumanov A.G., Sharafullin I.F. "Phase transitions and critical phenomena in superlattice multiferroic nanofilms" // Book of Abstracts Moscow International Symposium on Magnetism «MISM-2017», М.: Printhouse.Leto, 2017. P.378.

109. Zharmukhametov A.R., Nugumanov A.G., Yuldasheva A.R. "Monte Carlo simulation of dynamic phase transitions in multiferroic films" // Book of Abstracts Moscow International Symposium on Magnetism «MISM-2017», М.: Printhouse.Leto, 2017. P.248.

110. Жармухаметов А.Р., Нугуманов А.Г., Кызыргулов И.Р., Шарафуллин И.Ф. Моделирование магнитоэлектрических свойств в сверхрешетках мультиферроиков, X Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», Уфа, 2018. с. 22-23.

111. Нугуманов А.Г., Кызыргулов И.Р., Шарафуллин И.Ф. Термодинамические свойства сверхрешёток с переменной спиновой концентрацией, V Всероссийская научная молодежная конференция с международным участием «Актуальные проблемы микро- и наноэлектроники» (28 – 31 мая 2018, Уфа, Россия), Уфа, РИЦ БашГУ, 2018, с. 27.
112. Нугуманов А.Г., Кызыргулов И.Р. Фазовая диаграмма и поверхностные свойства в нанопленках с конкурирующим обменным взаимодействием, IV Межрегиональная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (25-27 апреля 2018, Уфа, Россия), Уфа, РИЦ БашГУ, 2018, с. 10.
113. Ildus F. Sharafullin, Aidar G. Nugumanov, Alina R. Yuldasheva, Ainur R. Zharmukhametov. Modeling of magnetoelectric, transport and surface properties in superlattices and nanofilms of multiferroics // Joint European Magnetic Symposium “JEMS-2018” (3 – 5 сентября 2018, Майнц, Германия), URL: [jems2018.org/files/boa/JEMS2018\\_BookOfAbstracts\\_PosterSessionB.pdf](http://jems2018.org/files/boa/JEMS2018_BookOfAbstracts_PosterSessionB.pdf)
114. Sharafullin, I. F., Nugumanov, A. G., Yuldasheva, A. R., Zharmukhametov, A. R., & Diep, H. T. (2019). Modeling of magnetoelectric and surface properties in superlattices and nanofilms of multiferroics. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 475(1), 453-457.
115. Sharafullin, I. F., Nugumanov, A. G., Yuldasheva, A. R., Nugaeva, N. M., Kharrasov, M. K., & Diep, H. T. (2020). Monte Carlo study of phase transitions and skyrmion crystal in magneto-antiferroelectric heterostructures with triangular lattice. *Челябинский физико-математический журнал*, 5(2), 202-210.
116. Sharafullin, I. F., Nugumanov, A. G., Nugaeva, N. M., & Diep, H. T. (2020). Skyrmions and Phase Transitions in Ferromagnetic/Ferroelectric Superlattices With Triangular Lattice. *IEEE Magnetics Letters*, 11(1), 1-5.

117. Nugumanov, A. G., & Sharafullin, I. F. (2022). Search for stable skyrmion lattices at the ground state in a multiferroic nanofilm using artificial neural networks. *Letters on Materials*, 12(2), 116-120.
118. И.Ф. Шарафуллин, А.Г. Нугуманов, А.Р. Юлдашева, А.Х. Баишева. «Применение искусственных нейронных сетей для распознавания фазы скирмионной решетки» // Труды XXVI Международного Симпозиума «Нанофизика и Нанoeлектроника» (14-17 марта 2022, Нижний Новгород, Россия), Нижний Новгород, Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2022, Т.1, с.396.
119. Ахметзянова Э.А., Баишева А.Х., Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф., Анализ магнитоэлектрических свойств и скирмионных решеток в магнитоэлектрических нанопленках с помощью искусственных нейронных сетей, VIII Межрегиональная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (22-23 апреля 2022, Уфа, Россия), Уфа, РИЦ БашГУ, 2022, с. 9.
120. I.F. Sharafullin, A.G. Nugumanov, A. Kh. Baisheva, A. R. Yuldasheva, H.T. Diep/ Stability of a Skyrmion Crystal in a Frustrated Antiferromagnetic Bilayer on a Triangular Lattice // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. – 2023 – V. 87 – № 4 – pp. 443-447.
121. A.G. Nugumanov, I.F. Sharafullin, M.Kh. Kharrasov. Skyrmion phases in ground state of magnetoelectric bilayer induced by planar Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *Letters on Materials*. - 2023. - V.13. - № 4. – PP. 317-322.
122. Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф., Абдрахманов Д.И. Плоскостная магнитная анизотропия на треугольной решётке, X Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», Уфа, 2023. с. 50.