

УДК 537.612.4:620.22+539.216.2+537.621

**ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗИНГОВСКОГО НАНОМАГНЕТИКА НА
ПОРОГ ОДНОМЕРНОГО ПРОТЕКАНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ
МАГНИТНОГО ПОЛЯ**

Е.П. Лаюров, В.Н. Удодов

*Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова
655017 г. Абакан ул. Ленина 90
evgeniy2007-85@mail.ru*

Изучено влияние энергии взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах на порог протекания магнетика нанометровых размеров в рамках модифицированной модели Изинга при наличии постоянного внешнего магнитного поля.

Введение

Исследование магнетизма является одной из важнейших задач современной физики конденсированного состояния [1]. В последние десятилетия большое внимание специалистов занимающихся исследованием и созданием новых материалов вызвали наноструктурные материалы [2]. Значительные усилия были направлены на изучение примесных и дефектных структур и при этом были синтезированы вещества, которые можно рассматривать как аналоги низкомерных магнитных систем [2, 3]. Моделирование таких систем может позволить продвинуться в создании теории конструирования принципиально новых наноструктурных материалов [4]. В этом отношении моделирование магнитных фазовых переходов представляют собой обширную и еще не завершённую область исследований, где в последние десятилетия активно выясняется природа переходов в магнитоупорядоченное состояние в самых разнообразных кристаллических телах [5]. Наибольший интерес представляет рассмотрение так называемых «смешанных» физических систем, в которых одновременно наблюдается сразу несколько явлений. С технической точки зрения большое значение представляет рассмотрение хорошо известного явления протекания применительно к магнитным системам.

Таким образом, целью работы является исследование методом компьютерного моделирования зависимости порога протекания от энергии взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах в псевдоодномерном магнетике при наличии внешнего магнитного поля. Для решения поставленной задачи использовалась модифицированная

модель Изинга, гамильтониан которой с учётом взаимодействия до четвёртой координационной сферы включительно имеет следующий вид:

$$\frac{E_0}{\omega_1} = -h \sum_{i=1}^N S_i - \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} - J_4 \sum_{i=1}^{N-4} S_i S_{i+4}, \quad (1)$$

где S_i – безразмерная проекция вектора спина на некую выделенную ось. Если $S_i = 1$ спин направлен вверх, если $S_i = -1$ спин направлен вниз, h – безразмерная напряженность магнитного поля (проекция на ту же ось), E_0 – энергия кристалла, ω_1 – энергия взаимодействия в первой координационной сфере, $J_2 = \omega_2/\omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия во второй координационной сфере, $J_3 = \omega_3/\omega_1$ и $J_4 = \omega_4/\omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах соответственно.

Температура системы θ измеряется в безразмерных единицах:

$$\theta = kT/\omega_1, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана; ω_1 – энергия взаимодействия в первой координационной сфере; T – абсолютная температура. При перколяционном подходе [6] $S_i = -1$ считается заблокированным узлом, а $S_i = +1$ – целым.

Зависимость порога протекания от взаимодействия во второй координационной сфере

В ходе компьютерного эксперимента были построены графики зависимости порога протекания P_c от относительного энергетического параметра взаимодействия во второй координационной сфере j_2 для случая малой наноманитной структуры при радиусе протекания $R = 3$ (третья координационная сфера включительно), температуре $\Theta = 0,1$ и постоянном магнитном поле без учета взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах. Из полученных графиков видно (рис.1), что с увеличением величины взаимодействия во второй координационной сфере (параметр j_2) порог протекания увеличивается от 0,5 и стремится к 1 при положительном значении j_2 .

Данное поведение можно объяснить с помощью диаграмм основных состояний. На соответствующей диаграмме (рис.2) область a представляет собой ферромагнетик, а $\Phi 1$ – ферромагнетик. Если увеличивать взаимодействие во второй координационной сфере j_2 , то порог

протекания в магнитной фазе из ферримагнетика в ферромагнетик испытывает скачок.

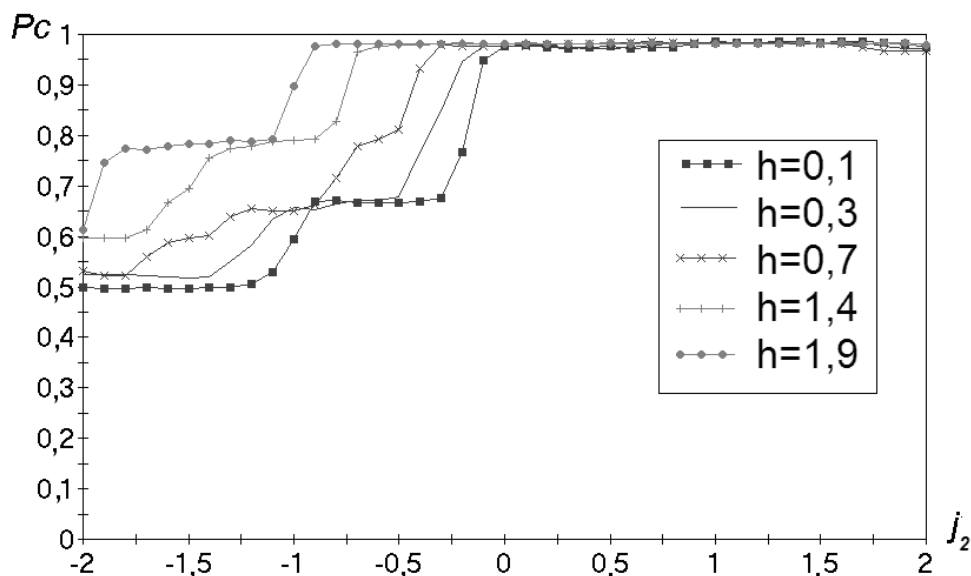


Рис.1 Зависимость порога протекания P_c от взаимодействия во второй координационной сфере j_2 , $R = 3$, $\Theta = 0,1$.

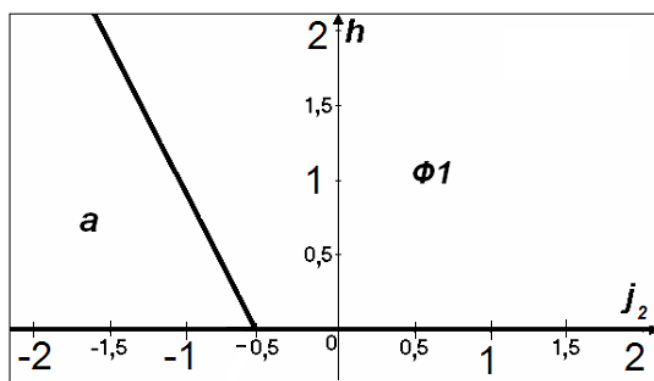


Рис.2 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика.

При этих же параметрах, была исследована зависимость порога протекания P_c от j_2 при разной начальной температуре Θ и фиксированном значении внешнего магнитного поля. Данная зависимость представлена на рис. 3. Из анализа полученных данных можно сделать вывод, что с увеличением температуры Θ графики становятся более плавными. Стоит отметить, что при разной температуре все графики проходят через одну точку в области $-0,5 < j_2 < -1,5$. Это можно объяснить тем, что именно в этой области находится граница между фазами a и $\Phi 1$ (рис. 2).

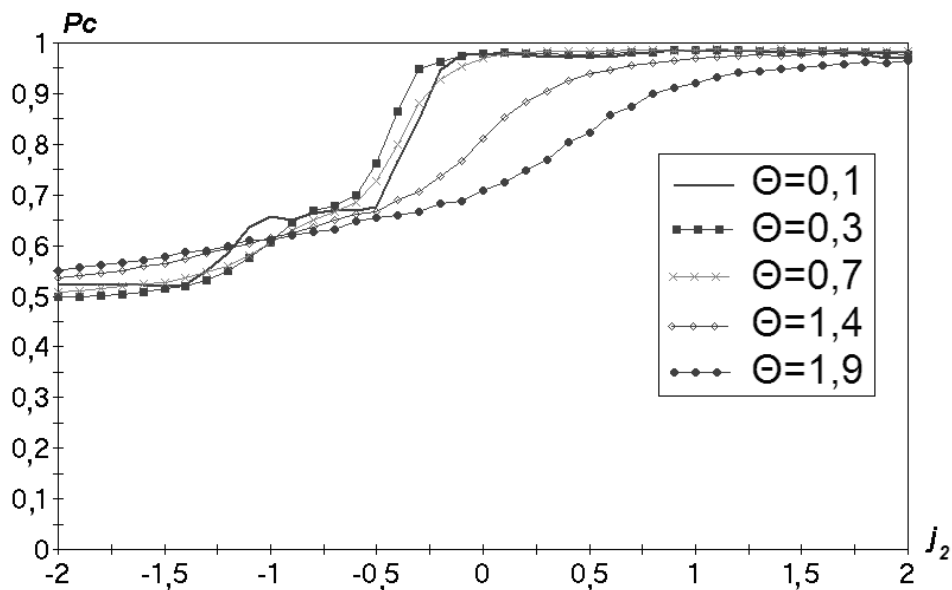


Рис.3 Зависимость порога протекания P_c от взаимодействия во второй координационной сфере j_2 , $R = 3$, $h = 0,3$.

Зависимость порога протекания от взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах

При исследовании зависимости порога протекания P_c от взаимодействия в третьей j_3 и четвёртой j_4 координационных сферах (рис. 4 и 5) соответствующие им диаграммы основных состояний обладали большим количеством различных магнитных фаз. Так на диаграммах присутствуют ферромагнетик, ферримагнетик и некоторые другие промежуточные магнитные фазы (рис. 6 и 7).

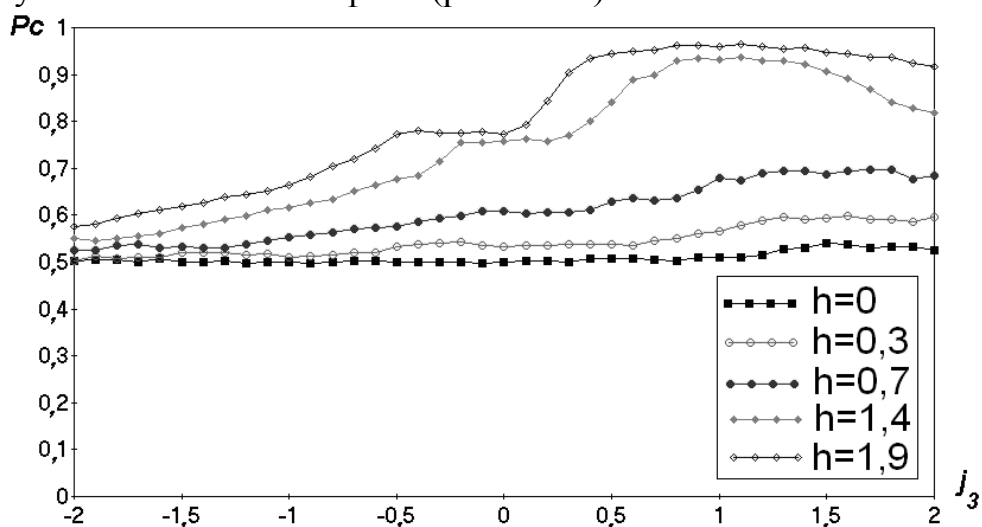


Рис.4 Зависимость порога протекания P_c от j_3 , $R = 3$, $j_2 = -1,3$, $\Theta = 0,3$, $h > 0$.

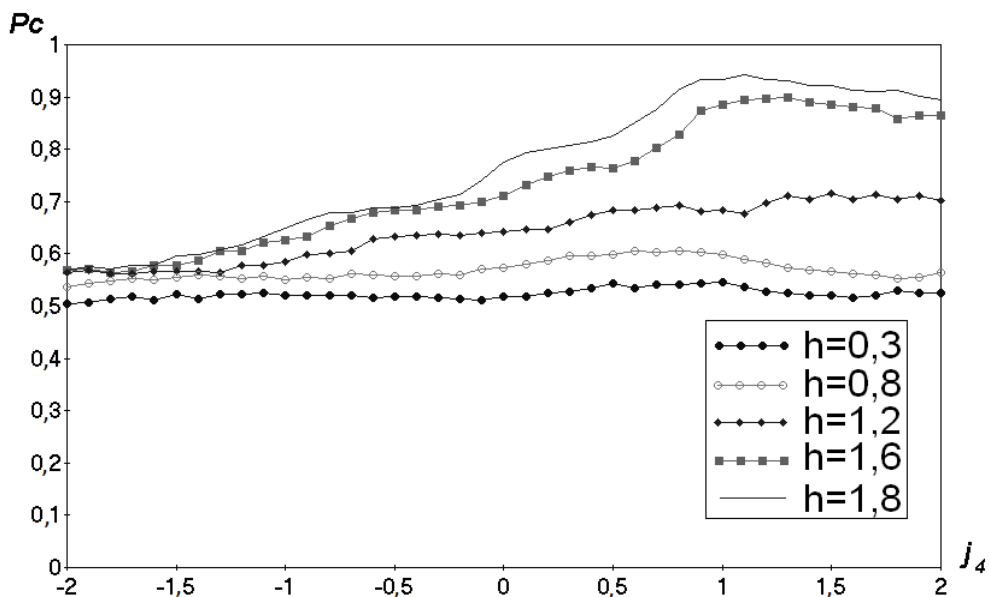


Рис.5 Зависимость порога протекания P_c от j_4 , $R=3$, $j_2=-0,7$, $j_3=-1,0$, $\Theta=0,3$, $h>0$.

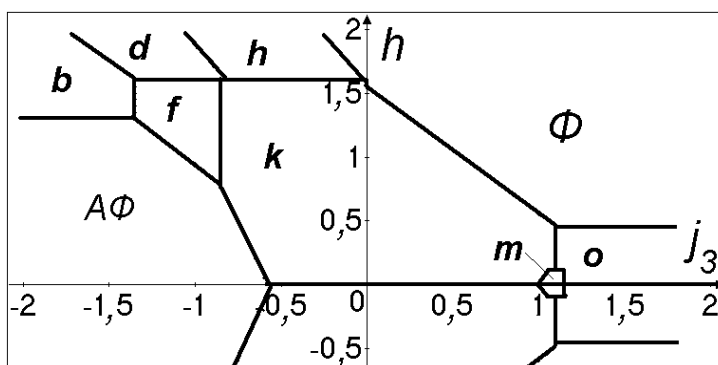


Рис.6 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика, при $j_2 = -1,3$. Φ : 1111111111; $A\Phi$: 11-1-1-1111-1-1; b : 111-1-1-1111-1; d : 1111-1-1-1111; f : 111-1-1111-1-1; h : 11111-1-1111; k : 11-1-111-1-111; m : 11-1-111-1-111; o : -111-111-111-1.

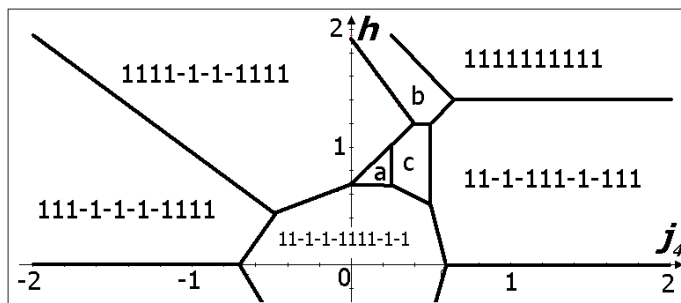


Рис.7 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика, $j_2 = -0,7$, $j_3 = -1,0$. a : 111-1-1-1111-1; b : 11111-1-1111; c : 111-1-1111-1-1.

Из-за того, что на диаграмме основных состояний присутствует много промежуточных магнитных фаз, характер изменения порога протекания различный. Если увеличивать взаимодействие в третьей и четвёртой координационных сферах, то при отсутствии внешнего магнитного поля ($h = 0$) график представляет почти прямую линию, то есть дальнейшее взаимодействие практически не влияет на порог протекания. При значительном магнитном поле ($h \approx 1,9$) порог протекания возрастает в зависимости от тех фаз на диаграмме, в которые попадает при увеличении j_3 или j_4 , то есть взаимодействие в третьей и четвёртой координационных сферах сильно влияет на порог протекания (рис. 6 и 7).

Проведённые дальнейшие исследования показали схожесть зависимостей порога протекания от взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах. Различие заключается в разных областях стабильности тех или иных магнитных фаз, что дает разный характер возрастания порога протекания. Данный вывод хорошо виден из анализа рисунков 4 и 5.

Заключение

Таким образом, взаимодействие во второй, третьей и четвёртой координационных сферах и величина магнитного поля существенно влияют на порог одномерного протекания. Показано, что при увеличении температуры графики зависимости порога протекания магнитной системы от параметров взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах становятся более плавными. Температура сглаживает графики не зависимо от радиуса протекания и размеров моделируемой системы.

Увеличение внешнего магнитного поля приводит к изменению характера зависимости порога протекания от параметра взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах. Порог протекания возрастает при значительном увеличении магнитного поля, а при его отсутствии практически не изменяется. В отличие от взаимодействия во второй координационной сфере, диаграммы основных состояний с учётом взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах имеют больше различных магнитных фаз.

По диаграммам основных состояний можно судить о магнитных фазах в том или ином состоянии, что позволяет проследить изменение порога протекания с учётом влияния внешнего магнитного поля и температуры.

Библиографический список

1. *Носкова, Н.И.* Субмикроструктурные и нанокристаллические металлы и сплавы / Н.И. Носкова, Р.Р. Мулюков. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 279 с.
2. *Удодов, В.Н.* Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н. Удодов, А.И. Потекаев, А.А. Попов и др. – Абакан: Издательство ХГУ им. Н. Ф. Катанова, 2008. – 158 с.
3. *Ландау, Л.Д.* Статистическая физика. Часть 1. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
4. *Камилов, И.К.* Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте – Карло / И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев // УФН. – 1999. – Т. 169. – №7. – С. 773-795.
5. *Санников, Е.В.*, Фазовые переходы в одномерных магнетиках / Е.В. Санников, Р.А. Козлитин, В.Н.Удодов, А.И. Потекаев // Известия ВУЗов. Серия «Физика». – 2006. – № 3. – С. 54–58.
6. *Эфрос, А.Л.* Физика и геометрия беспорядка / А. Л. Эфрос. – М.: Наука, 1982. – 270 с.