

УДК 536.7

ХАРАКТЕРИСТИКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МАГНИТНЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Е.В. Галичина, Д.В. Спиринов, В.Н. Удодов

*Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, 655000, Республика**Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, 90**galichinaev@mail.ru*

Методом Монте-Карло исследовано влияние внешних и внутренних параметров на время релаксации и критические индексы при переходе из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние в рамках одномерной модифицированной модели Изинга.

В настоящее время уникальные физические свойства наночастиц, возникающие за счёт поверхностных или квантово-размерных эффектов, являются объектом интенсивных исследований. Особое место в этом ряду занимают магнитные характеристики наночастиц, так как здесь наиболее отчётливо выявлены различия (иногда очень существенные) между компактными магнитными материалами и соответствующими наночастицами [1]. Существенный прогресс в понимании свойств и термодинамики квазиодномерных систем достигнут благодаря использованию численных методов, так как строгое исследование нетрадиционных моделей на основе микроскопических гамильтонианов является чрезвычайно сложной, а зачастую и неразрешимой задачей [2]. В нашей работе исследование магнитных свойств наноматериала основывается на применении метода Монте-Карло [3].

Рассмотрим псевдоодномерную цепочку, состоящую из взаимодействующих между собой спинов s (магнитные моменты). Энергия взаимодействия пары соседних спинов определяется формулой:

$$E_{ii+1} = -J_1(s_i s_{i+1}). \quad (1)$$

Полная энергия E и намагничённость M данной конфигурации спинов $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ могут быть найдены суммированием по всей цепочке. В традиционной модели Изинга каждый спин может принимать только два выделенных направления $s_i = \pm 1$ (вверх или вниз).

В представляемой работе используется модифицированная модель Изинга, учитывающая также взаимодействие во второй координационной сфере, что необходимо для более адекватного учета факторов, присущих реальным системам. Для уменьшения числа изменяемых энергетических характеристик рассматривается гамильтониан приведенный к энергии взаимодействия в первой координационной сфере:

$$\frac{E}{J_1} = -\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2)$$

где J_1 – энергии взаимодействия в первой координационной сфере, J_2 – относительная энергия обменного взаимодействия во второй координационной сфере, H – относительная напряженность внешнего магнитного поля, S_i – проекция вектора спина на выбранную ось, N – количество атомов системы, i – номер узла.

Ниже представлены результаты исследования неравновесного фазового перехода в низкоразмерном изинговском магнетике из антиферромагнитной в ферромагнитную фазу. Учитывалось взаимодействие в первой и второй координационных сферах, а также наличие в образце примесных немагнитных атомов. На основе представленной модели изучалось влияние приведенной температуры T (выраженной в единицах J_1/k_B) и напряженности внешнего магнитного поля на фазовый переход в системе без учета периодических граничных условий. При этом атомы примеси в течение всего процесса занимают фиксированное положение в пространстве («заморожены»), что соответствует низким температурам, меняется только направление магнитных моментов в соответствии с алгоритмом Метрополиса [4].

На рис. 1 показано влияние температуры на время перехода в ферромагнитную фазу (время релаксации) при различном размере системы с одним примесным атомом (на врезке к рисунку первое значение – это длина цепочки, второе – число примесных атомов). Характер зависимости подобен поведению времени релаксации в модели, не учитывающей наличие примесей в отсутствии внешнего магнитного поля.

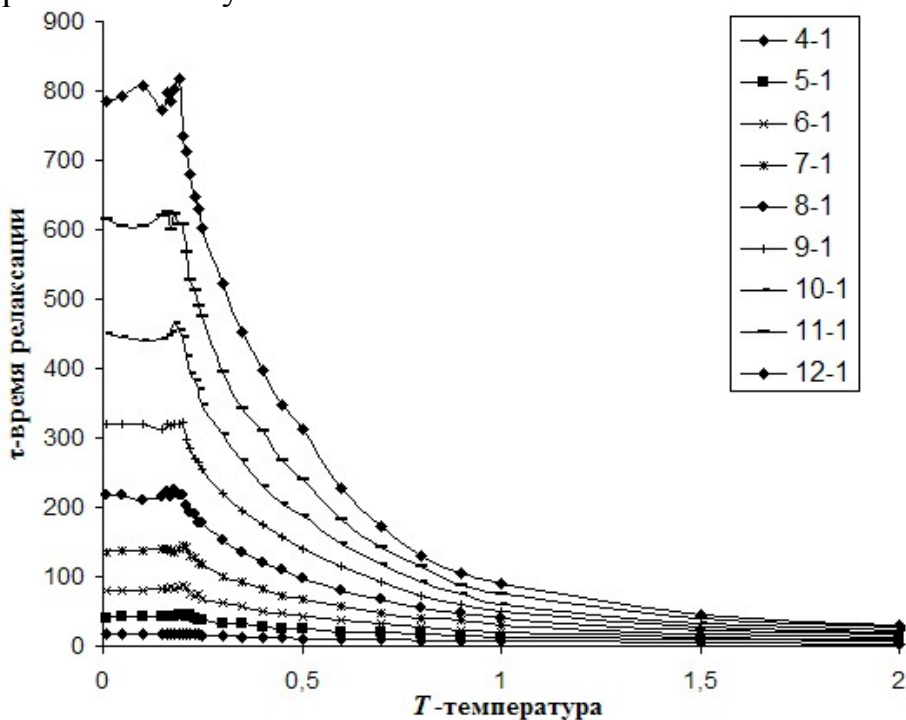


Рис. 1. Зависимость времени релаксации от температуры ($H=0; J_2=0$).

При низких температурах τ практически не зависит от T , аналогично результатам, полученным в [5], на границе этой области наблюдается максимум, но при этом присутствие даже одного примесного атома значительно уменьшает время релаксации. При рассмотрении обратного перехода (из ферромагнитной в антиферромагнитную фазу) зависимость $\tau(T)$ аналогична результатам [6]. Увеличение доли примесей в системе приводит к расширению горизонтальной области графика на более высокие температуры.

Уменьшение доли примесных атомов приводит к монотонному увеличению времени релаксации, причем эта зависимость становится более сильной в случае низких температур (рис. 2).

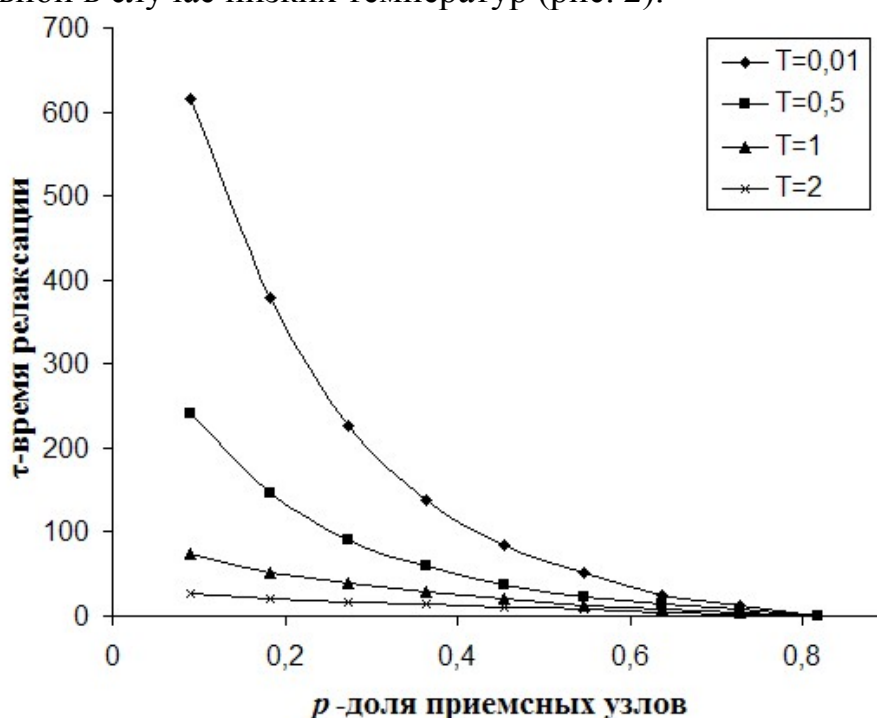


Рис. 2. Зависимость времени релаксации от доли примесей ($T=0,5; J_2=0$).

В присутствии внешнего магнитного поля и стремлении приведенной температуры к нулю время релаксации устремляется в бесконечность (рис. 3), что соответствует теоретическим представлениям. Процессы, происходящие в магнетике, можно условно разделить на два типа. Первый — «быстрый» — в котором формируется ферромагнитная фаза. При этом в проведенной серии опытов образуются как магнетики, у которых магнитный момент сонаправлен с направлением внешнего магнитного поля, так и те у которых магнитный момент направлен в противоположную сторону.

Второй процесс «медленный» — на этом этапе происходит переориентация спинов магнетиков, попавших в метастабильное состояние. Для такого перехода система должна преодолеть значительный

потенциальный барьер, что маловероятно с учетом низких температур, существующих в системе. Именно этот процесс приводит к резкому увеличению времени релаксации при уменьшении температуры, так как чем ниже температура, тем сложнее выйти из метастабильного состояния.

Напомним, что в отсутствие внешнего поля при низких температурах наблюдалась аномальная область, в которой время релаксации практически не зависит от температуры (на рис. 1 это соответствует области при температуре $T < 0,2$).

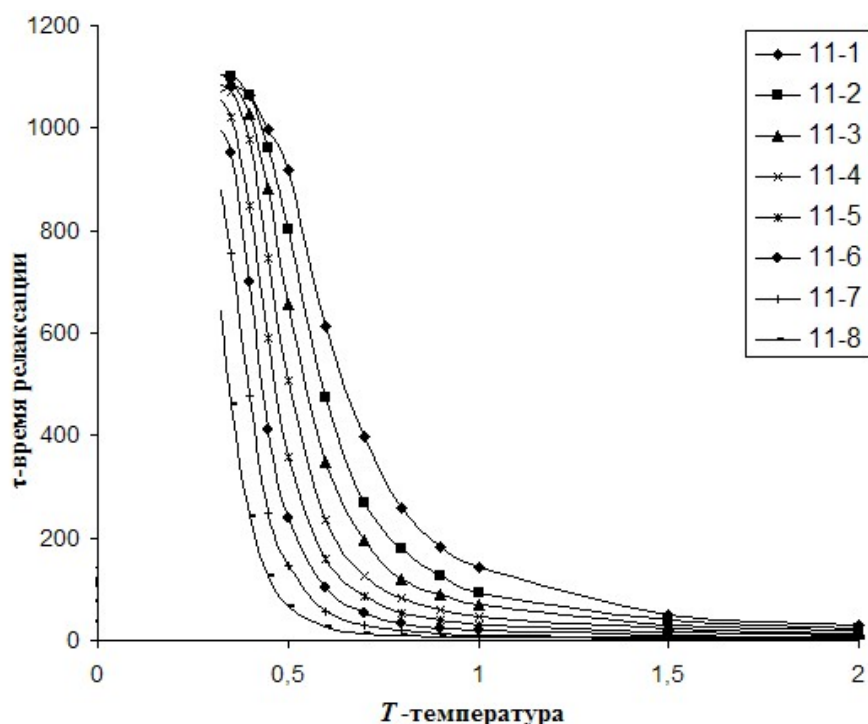


Рис. 3. Зависимость времени релаксации от температуры ($H=0,1; J_2=0$).

Зависимость времени релаксации от напряженности внешнего магнитного поля является немонотонной: на рис. 4 наблюдается максимум. Увеличение числа примесных атомов приводит к смещению данных максимумов влево и уменьшению времени релаксации.

Рост доли примесных атомов приводит к уменьшению времени релаксации вне зависимости от напряженности внешнего магнитного поля или его отсутствия (рис. 5). Для сравнения на графике приведена кривая, соответствующая переходу в экранированной от внешнего магнитного воздействия системе (нижняя кривая). При этом, когда доля примесных атомов велика (для данных параметров $p > 0,3$) время релаксации без поля меньше, чем при наличии сильного поля.

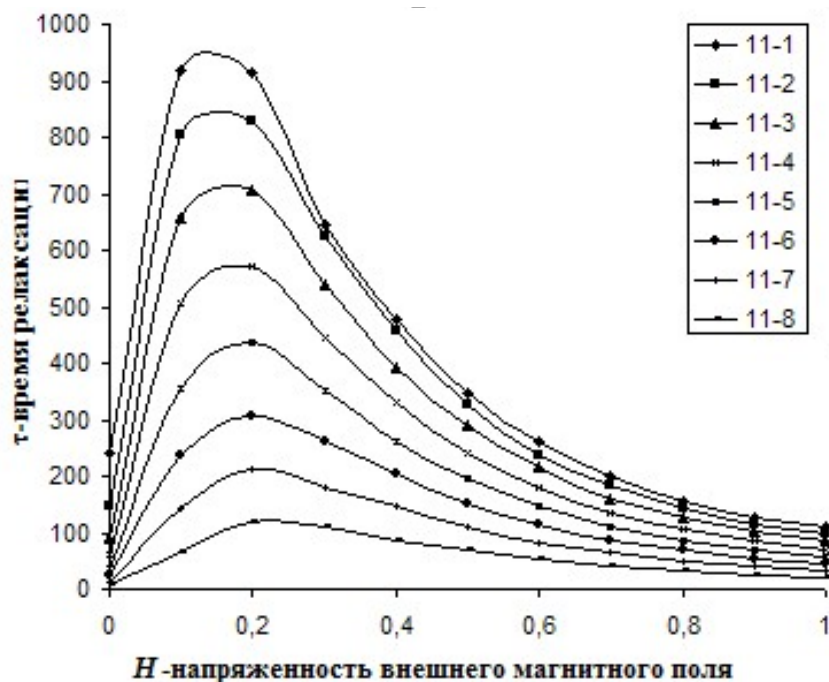


Рис. 4. Зависимость времени релаксации от напряженности ($T=0,5; J_2=0$).

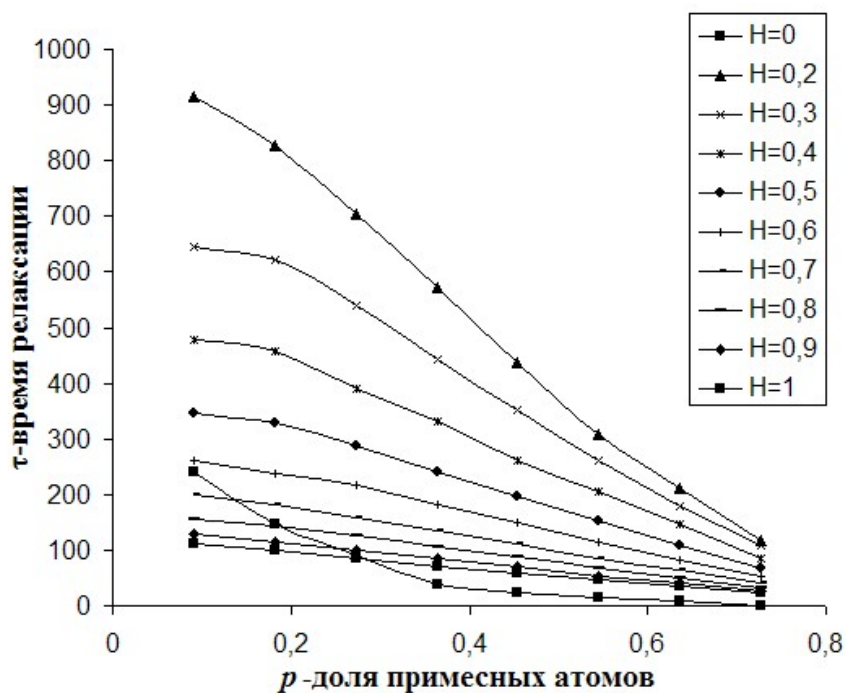


Рис. 5. Зависимость τ от доли примесных атомов ($T=0,5; J_2=0$).

Зависимость времени релаксации от энергии взаимодействия во второй координационной сфере приведена на рис. 6.

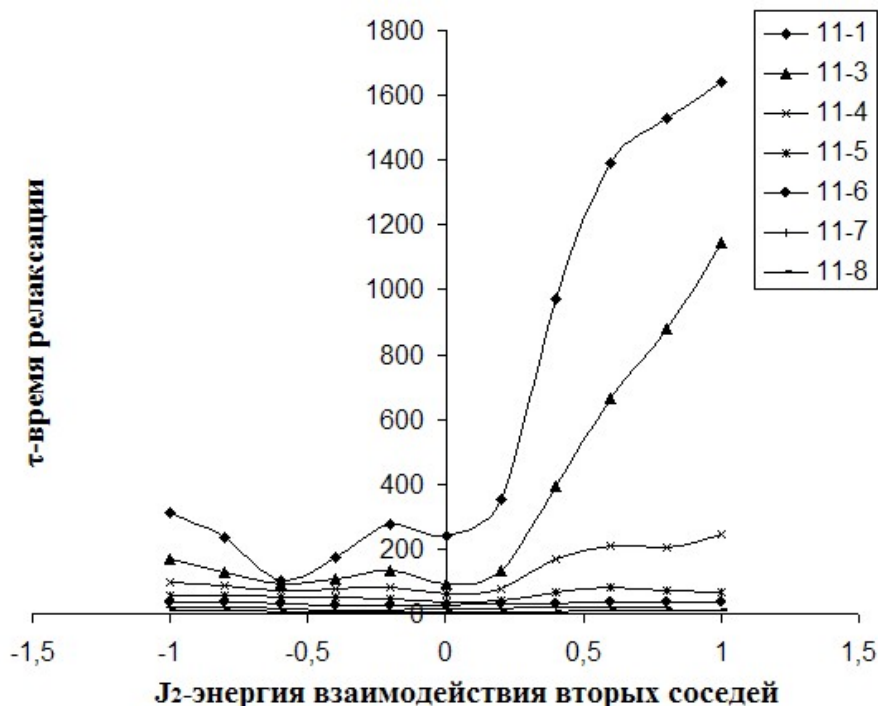


Рис. 6. Зависимость времени релаксации от энергии взаимодействия вторых соседей ($H=0$; $T=0,5$).

Представленная зависимость является немонотонной, но в целом увеличении данной энергии способствует замедлению фазового перехода. При значительной энергии взаимодействия во второй координационной сфере в начале кривой зависимости $\tau(p)$ наблюдается максимум (рис. 7).

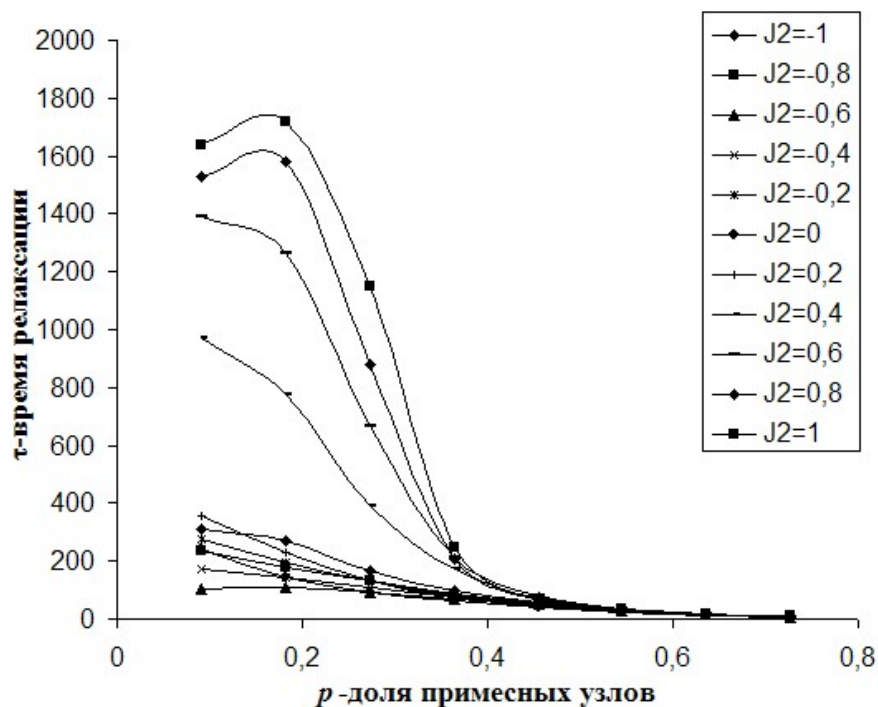


Рис. 7. Зависимость времени релаксации от доли примесных атомов ($T=0,5$; $H=0$).

Интересным является то, что при достаточном числе примесей в образце (на графике $p > 0,5$) изменение J_2 практически никак не влияет на время релаксации.

Далее был рассчитан динамический критический индекс z . Он характеризует степень зависимости времени релаксации от количества узлов в системе и может быть найден из соображения, что $\tau \propto N^z$. Рост температуры приводит к постепенному снижению зависимости времени релаксации от размеров системы – индекс z уменьшается (рис. 8). При увеличении длины цепочки степень зависимость времени релаксации от размеров системы также уменьшается. Об этом говорит уменьшение критического индекса z при возрастании N_{cp} (рис. 9).

Характер поведения времени релаксации и критических индексов в зависимости от температуры при наличии немагнитных атомов в цепочке, в целом, аналогичен случаю, не учитывающему наличие примесей. Рост доли примесных атомов приводит к уменьшению времени релаксации, за исключением ситуации, когда энергия взаимодействия во второй координационной сфере превосходит предельное значение. Зависимость времени, затрачиваемого на переход из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние, от напряженности внешнего магнитного поля и энергии взаимодействия во второй координационной сфере немонотонна.

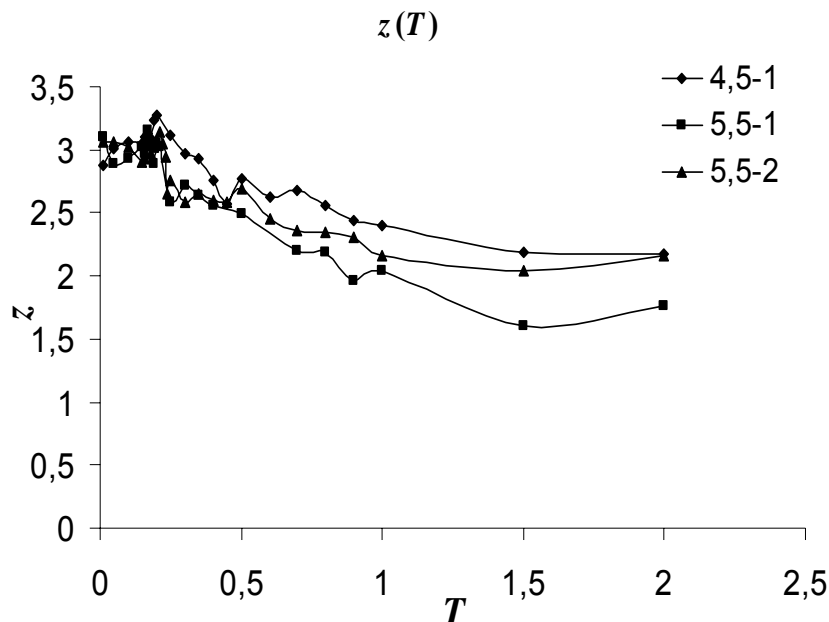


Рис. 8. Зависимость динамического индекса от температуры ($H=0$).

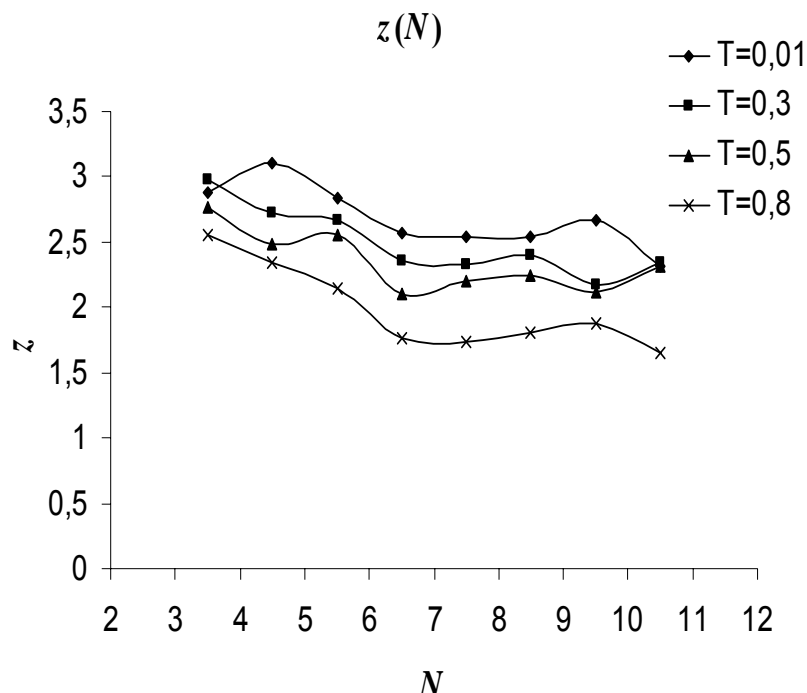


Рис. 9. Зависимость динамического индекса от длины цепочки атомов ($H=0$).

Библиографический список

1. Российский Химический Журнал: Журнал Российского химического общества им. Д. И. Менделеева / – М., 2000. – XLIV. – № 6.
2. *Ибаев Ж.Г.* Исследование термодинамических и критических свойств сложных моделей магнетиков методами Монте-Карло: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07: защищена 12.02.08; утв. 24.06.08 / Ибаев Жавраил Гаджиевич. – Д., 2008. – 164 с.
3. *Ермаков, С.М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы / С.М. Ермаков. – М.: Мир, 1975. – 217 с.
4. *Биндер, К.* Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндера. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
5. *Галичина Е.В.* Кинетические свойства одномерного изинговского магнетика / Е.В. Галичина, Д.В. Спирин, В.Н. Удодов // «Физика и химия высокоэнергетических систем». - Материалы IV Всероссийской конференция молодых ученых. – Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. – С. 189 - 192.
6. *Спирин Д.В.* Кинетические свойства малого одномерного изинговского магнетика / Д.В. Спирин, В.Н. Удодов, А.И. Потекаев, Н.С. Голосов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2005. – Т. 48. – №4. – С. 65-69.