СТАБИЛЬНОСТЬ СТРУКТУР МАЛОГО ОДНОМЕРНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА В РАМКАХ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Е.В. Санников, В.Н. Удодов
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, Россия

В настоящее время как у нас в стране, так и за рубежом, проявляется большой интерес к исследованию малых квазиодномерных магнетиков, обусловленный перспективностью их использования в качестве магнитных носителей информации нового поколения [1].

Малые квазиодномерные системы обладают также многими полезными физическими свойствами, например, такими как пьезоэлектрические свойства, оптическая активность и т.д. [2]. Однако ввиду малости размеров таких систем и ряда других факторов, их непосредственное исследование в реальном эксперименте вызывает существенные трудности. Именно поэтому, компьютерное моделирование является альтернативным, а в некоторых случаях и единственным методом исследования низкоразмерных магнетиков. При этом исследование стабильности различных структур, как чистого ферромагнетика, так и с вмороженной немагнитной примесью – одна из центральных проблем физики магнетизма, в том числе и для малых низкоразмерных систем. Поэтому расчёт диаграмм стабильности фаз одномерного ферромагнетика является одной из первоочередных задач исследования малых низкоразмерных магнитных систем

1. Модель

При исследовании низкоразмерных магнетиков большую роль играет выбор модели, которой описывается данная магнитная система. Наиболее подходящая в таком случае является модель Изинга. Во-первых, она самая простая модель, в которой можно исследовать ФП, во-вторых, допускает строгое математическое исследование.

Пусть существует магнетик, состоящий из атомов, расположенных в узлах одномерной решетки конечного размера. Имеется N узлов, можно считать каждый атом магнитной стрелкой, направленной всегда либо вдоль некоторой заданной оси, либо в противоположном направлении. Таким образом, каждый атом имеет две возможные конфигурации, которые можно описывать с помощью «спиновой» переменной $s_i = +1$ (спин направлен вверх) или $s_i = -1$ (спин направлен вниз). В памяти ЭВМ, например, магнитная структура размером из пяти узлов ↑↓↑↓↑ представлена в виде одномерного массива S={1-11-11} Энергия магнетика вычисляется по формуле

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

где E – энергия модели, E_0–энергия кристалла, ω_1 – энергия взаимодействия ближайших соседей, H – безразмерная напряженность магнитного поля, $J_2=\omega_2/\omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия вторых соседей, $J_3=\omega_3/\omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия третьих соседей. Здесь взаимодействие между ближайшими соседями считается ферромагнитным, т.е. $\omega_1 > 0$, а ω_2 и ω_3 могут иметь любой знак.

2. Диаграммы основных состояний модели квазиодномерного магнетика

Для того, чтобы ориентироваться в выборе энергетических параметров H, J_2, и J_3, был разработан комплекс алгоритмов и программ позволяющий строить диаграммы основных состояний (ДОС), а также изотермические фазовые диаграммы модели магнетика. Исследуется модель магнетика в виде цепочки с оборванными концами.

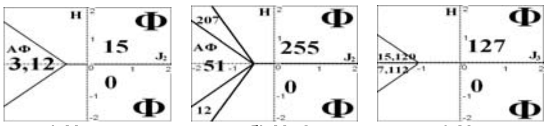
Рассматривается плоскость энергетических параметров, по одной оси которой отложена напряжённость поля H, по другой — параметр J_2 или J_3. Начальные и конечные значения данных параметров H, J_2 или J_3 вводятся в программу. В каждой точке диаграммы, перебирая все возможные конфигурации, программа определяет структуру с наименьшей энергией или набор структур с наименьшей энергией – такое состояние и является основным при температуре абсолютного нуля. В результате плоскость разбивается на области, в которых стабильна определённая структура или набор структур, перечисленных через запятую:

Номерами на ДОС указаны конфигурации стабильных фаз, а жирными линиями отмечены границы между ними. Саму конфигурацию получаем путем перевода данного номера, в его двоичное представление, заменяя затем “0” на “-1” с учётом размеров системы. Например, для N=4 (рисунок 1а), десятичный номер конфигурации 12_{10} в двоичном виде представлен следующим образом 1100_2; поэтому, заменяя “0” на “-1” получим структуру S={11-1-1} стабильную в данной области. Обозначением “Ф” отмечены области с ферромагнитным порядком (рис. 1), а “АФ” – с антиферромагнитным (рис. 1а,б). При изменении внешнего магнитного поля в модели происходят магнитные фазовые переходы, так как изображающая точка на ДОС пересекает границы стабильности фаз.

Отметим, что все ДОС обладают симметрией относительно изменения знака напряженности поля. Например, для размеров системы N=4, фазы “Ф” с номерами 0 (-1-1-1-1) и 15 (1 1 1 1), – это ферромагнитные фазы с противоположными значениями намагниченностей (рисунок 1а).

Методами моделирования выявлены основные закономерности ДОС одномерного магнетика в координатах H и J_i при условии, что $J_2= J_3=…=J_{i-1}=1$:

1) На всех ДОС, с увеличением размеров системы до N=3i (i – число соседей участвующих во взаимодействии), стабильность “Ф” фазы уменьшается и в дальнейшем остаётся постоянной для всех систем с N≥3i при $J_i>-0,5(i-1)$ и $|H| > -2J_i-(i-1)$.



а) N=4 б) N=8 при J_2=1 в) N=7

Рисунок 1 – Диаграммы основных состояний одномерного магнетика

2) Ферромагнитная область “Ф” присутствует на всех ДОС при $J_2>0$ (абсолютно все связи: и первые, и вторые и i-ые понижают энергию системы), при этом её стабильность (ширина области) увеличивается с увеличением радиуса взаимодействия i. Размеры системы, при которых на ДОС появляются “АФ” фаза, описываются формулой вида N_{af} = 2in, где n-целое неотрицательное число. В отличие от фазы “Ф”, ширина стабильности “АФ” фазы не зависит от размеров системы и реализуется при $J_i<-0,5(i-1)$ и $|H| < -J_i-0,5(i-1)$.

3) Начиная с N=2i-1 с интервалом ΔN = 2i, ДОС будут повторяться, включая дополнительные линии, граничащие с “Ф” фазой.

Рассматривая ДОС в координатах H и J_2 нужно отметить, что появление “АФ” структур с попарно чередующимися значениями спинов связано именно с большими значениями $|J_2|$ ($|J_2|>|J_1|$). Действительно, в структурах типа (-1-111-1-111) (рис. 1б, обл. с номером 51) абсолютно все связи вторых соседей (являющиеся главными при $|J_2|>|J_1|$) понижают энергию системы. Связи первых ближайших соседей понижают энергию через раз.

Также было, исследовано влияние обменного параметра J_{i-1} на вид ДОС в координатах H и J_i. Показано, что с уменьшением J_{i-1} ферромагнетик становится всё менее стабильным, а при J_{i-1}= -0,5(i-1) большинство линий равновесия фаз сходятся в начале координат.

В реальных веществах всегда присутствуют некоторые примеси. При исследовании критических явлений необходимо их учесть [3]. Например, в ферромагнитном кристалле часть узлов может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент s_i = 0. Если концентрация таких атомов превысит определённую величину, ферромагнетизм полностью подавляется. Поэтому значительный интерес представляет исследование стабильности магнетика с немагнитной примесью. Рассмотрена новая усовершенствованная модель магнетика в виде цепочки с оборванными концами с одним примесным немагнитным атомом. Внутри ЭВМ примесь представлена в виде нуля (например, структура с примесью на третьем узле имеет вид ↑↑0↓↑ или в массиве ЭВМ 110-11). Кристаллу из N узлов с одним немагнитным атомом уже соответствуют $N2^{N-1}$ возможных конфигураций (магнитных фаз) в отличие от 2^N для чистого ферромагнетика. Разработана методика определения номера конфигурации с немагнитной примесью. Пусть K – номер конфигурации, тогда справедливые следующие соотношения:

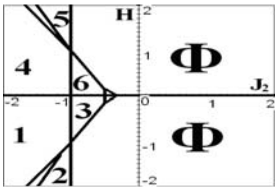
$$K_0 = (K \text{ div } 2^{N-1})+1, \tag{2}$$

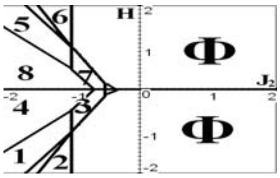
$$DEC = K - (K_0-1)2^{N-1}, \tag{3}$$

где K_0 – номер узла, на котором находится немагнитная примесь, div – операция целочисленного деления, а DEC - десятичное представление конфигурации, если бы примесь была удалена. Немагнитная примесь здесь является вмороженной, т.к. ДОС строятся при абсолютном нуле.

Из результатов компьютерного эксперимента установлено следующее. 1). Число различных магнитных структур, в среднем, в 2 раза больше по сравнению с ДОС образца без примеси (рисунок 2). 2).

Количество реализующихся областей ферромагнетизма (дополнительные “Ф”-области 5 и 2 рисунок 2а) и антиферромагнетизма ровно в 2 раза больше по сравнению с ДОС чистого образца, причём соответствующие эквивалентные области “Ф” и “АФ” граничат между собой линией с уравнением J_2= -1 (рис. 2). Область “АФ” существует только для нечётных размеров системы в отличие от чистого образца.





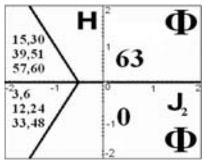
а) N=7. б) N=8

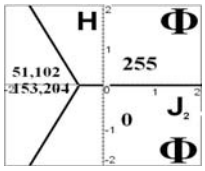
1-(12); 2-(128); 3-(140) 1-(12,24,908,920); 2-(256,384,512,640); 3-(280,396,536,652); 4-(204,793)

Рисунок 2 – Диаграммы основных состояний магнетика с немагнитной примесью. Числами на ДОС указаны области стабильных фаз. Каждому числу (области) соответствует номер стабильной конфигурации, указанный в скобках в подписи к диаграмме, или несколько номеров, перечисленных через запятую.

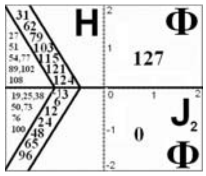
Выше рассматривалась изинговская цепочка атомов с оборванными концами. Наложим теперь на неё периодическое граничноё условие, заключив её в кольцо $s_1 = s_{N+1}$. Предполагается, что за узлом N следует узел 1, так что s_{N+1} совпадает с s_1 в формуле (1). Условия такого типа часто полезны хотя бы потому, что обеспечивают эквивалентность узлов и трансляционную инвариантность системы [4].

Показано, что при замыкании цепочки в кольцо для модели квазиодномерного ферромагнетика существует всего 3 различных вида ДОС (рисунок 3), а количество возможных вырожденных ферримагнитных структур равно N, что больше, чем у цепочки с оборванными концами, что и ожидалось, т.к. система является трансляционно-инвариантной. На ДОС n – целое неотрицательное число.





а) N= 6 + 4n б) N = 8+4n



в) N=7+4n

Рисунок 3 – Диаграммы основных состояний замкнутой в кольцо цепочки

3. Изотермические фазовые диаграммы (ФД) модели квазиодномерного магнетика

ДОС – это частный случай фазовых диаграмм при нулевых температурах. Для построения ФД при температурах больше нуля, моделирование проводилось методом Монте-Карло [5]. Исследования модели должно производиться в диапазоне относительно-низких температур, т.к. именно в этом диапазоне имеют место кооперативные явления, в частности фазовые переходы. Алгоритм состоит в выборе вероятностей перехода из одного состояния (S) в другое ($S^{/}$), отличающееся значением только одного спина. В качестве вероятности переходов выбиралась функция Метрополиса

$$P(S \to S^{/}) = \begin{cases} \exp(-\dfrac{\Delta E}{\theta}), \text{если} & \Delta E > 0, \\ 1 \quad\quad \text{если} & \Delta E \le 0. \end{cases} \tag{4}$$

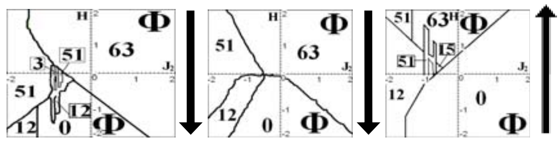
Обоснованность применения метода Монте-Карло (МК) к исследованию магнитных превращений в рамках модели Изинга, заключается, во-первых, в зависимости вероятности перехода от относительной температуры $\theta = k_Б T/\omega_1$, это позволяет учитывать влияние температуры; во-вторых, возможен учет энергетических барьеров ΔE (разность энергий новой и старой конфигураций), что позволяет исследовать метастабильные состояния. Если энергия понижается, т.е. $\Delta E<0$, переход из состояния (S) в состояние ($S^{/}$) происходит обязательно, а иначе либо происходит, либо нет. Была разработана программа и соответствующий алгоритм, позволяющие рассчитывать фазовые диаграммы при отличных от нуля температурах. Его суть в следующем: моделируется процесс, при котором напряженность внешнего поля изменяется (увеличивается, либо уменьшается) при втором постоянном параметре J_2 через определенное количество шагов МК на узел (nmcs). После nmcs шагов запоминается реализованная структура. Процесс повторяется многократно, в результате чего в каждой точке диаграммы получается набор структур, среди которых и выбирается структура, реализованная чаще других, она и будет стабильна (или метастабильна) в данной точке ФД. Таким образом, на ФД представлены изотермические неравновесные процессы при отличной от нуля температуре.

Моделировались два вида процессов, при первом напряжённость поля H увеличивается (прямой процесс), при втором уменьшается (обратный).

Было обнаружено, что ФД являются почти симметричными относительно выбора направления процесса. Если повернуть ФД на 180 градусов вокруг оси, получим очень похожую диаграмму для противоположного процесса при той же температуре (рисунок 4а,в), причем спины магнетика, соответствующих магнитных фазовых областей, имеют преимущественно такое же направление, как и внешнее магнитное поле H. Можно предположить, что это объясняется наличием “гистерезиса”, обусловленного предысторией состояния образца.

При малых температурах фаза “Ф” становится более устойчивой по сравнению с ДОС (рисунок 4а,б), появляются некоторые метастабильные области (область 3,5 и 6), не наблюдающиеся на ДОС.

Влияние температуры на ФД проявляется в следующем. При достаточно малых температурах (θ = 0,1) ширина верхней “Ф”-области увеличивается, следовательно, увеличивается и её стабильность при данных энергетических параметрах (рисунок 4а). Однако ширина нижней “Ф”-области уменьшается на величину большую, чем возросла верхняя “Ф”-область, так как вытесняется ещё и фазой 12 (рисунок 4а), являющейся метастабильной при данных энергетических параметрах. При увеличении температуры до θ=0,3 фазовые границы между всеми областями сначала искривляются, а затем все более приближаются к таковым на ДОС. Это справедливо как для "прямого" так и "обратного" процессов.



а) б) в)

а) θ=0,1. 1,3-(12); 2-(0);
б) θ=0,3. 1-(12); 2-(51)
в) θ=0,1 4,6- (51); 5-(3)
верхняя “Ф”-область с номером 63 (↑↑↑↑↑↑);
нижняя “Ф”-область с номером 0 (↓↓↓↓↓↓)

Рисунок 4 – Фазовые диаграммы обратного перехода для N=6, J_3=0. Стрелкой показано направление процесса.

При более высоких температурах тепловое движение разрушает упорядоченность структур, образуется хаос и фазовые границы размываются, что в реальных кристаллах не реализуется.

Заметим, что в методе МК решающее значение, особенно при низких температурах имеет выбор начальной конфигурации, поэтому в качестве начальной конфигурации выбиралась структура стабильная на ДОС при фиксированных энергетических параметрах.

Одним из критериев, позволяющих судить, насколько можно доверять результатам компьютерного эксперимента может служить распределение Гиббса справедливое для систем находящихся в состоянии термодинамического равновесия. Поэтому целесообразно сравнить результаты расчетов, выполненных в рамках распределения Гиббса и по методу Монте-Карло (МК) в среде объектно-ориентированного программирования Borland Delphi 7. Оказалось, что для любой структуры, при любых значениях энергетических параметров, теоретическая кривая распределения Гиббса очень близка к аналогичной кривой рассчитанной по методу МК при достаточно большом числе nmcs (рисунок 5) (в среднем отклонение около 3%). Кроме того, полученные результаты прошли проверку известным статистическим критерием “хи-квадрат” [6]. Было установлено, что полученные значения статистики “хи-квадрат” во всех экспериментах лежат в “правильных” процентных диапазонах и, таким образом, можно считать, что генератор псевдослучайных чисел среды Delphi7, где проводилось моделирование, удовлетворяет поставленным задачам моделирования.

Заключение

Проведено комплексное исследование стабильности модели малого одномерного магнетика с ферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседями ($\omega_1 > 0$). Разработана методика построения диаграмм основных состояний и фазовых диаграмм модели.

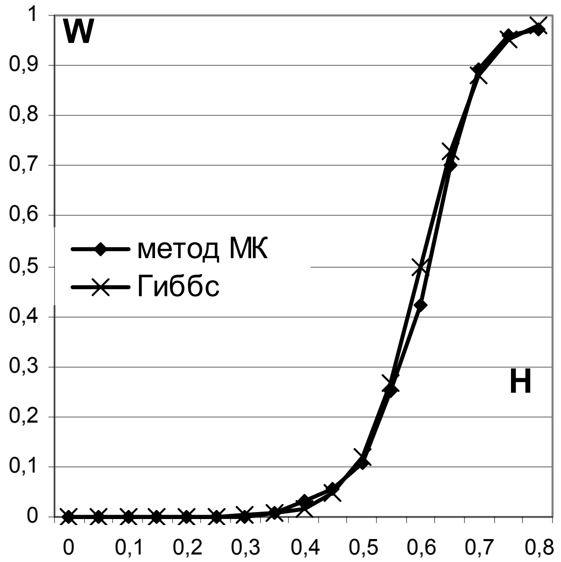


Рисунок 5 – Сравнение вероятностей реализации “Ф”– структуры по Гиббсу и Монте-Карло при θ = 0,11

Проанализированы построенные ДОС с учётом взаимодействия первых, вторых и третьих соседей. Указаны точные параметры существования ферромагнитной и антиферромагнитной фазы. Исследовано влияние обменного параметра J_{i-1} на вид ДОС в координатах H и J_i.

На основе усовершенствованной модели, исследовано влияние немагнитного примесного атома на систему. Показано, что вмороженная немагнитная примесь существенно влияет на характер, реализующихся ДОС. Установлено, что при замыкании цепочки в кольцо (периодические граничные условия) существует всего 3 различных вида ДОС.

В рамках разработанного комплекса алгоритмов и программ построены фазовые диаграммы с учётом метастабильных состояний одномерного магнетика. Показано, что вид ФД зависит от направления процесса. Исследовано влияние температуры на ФД. При конечных температурах на фазовых диаграммах вблизи границы стабильности некоторых фаз появляются дополнительные метастабильные области.

Разработанный комплекс алгоритмов и программ позволяет, во-первых, моделировать магнитные фазовые превращения в условиях, близких к реальным при ненулевых температурах, во-вторых, учитывать кинетические особенности данных превращений, определять области метастабильных состояний. Достоверность результатов прошла проверку известным статистическим критерием “хи-квадрат” и распределением Гиббса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. // УФН. – 1999. – Т.169. №7. – С. 773-795.
2. Александров К.С., Федосеева Н.В., Спевакова И.П. Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах. – Новосибирск: Наука, 1983. – 192 с.
3. Ма Ш. Современная теория критических явлений. – М.: Мир, 1980. – 304 с.
4. Бекстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – 488 с.
5. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Ч. II. – М.: Мир, 1990. – 400 с.
6. Кнут Д. Искусство программирования для ЭВМ. Т.2. Получисленные алгоритмы. – М.: Мир, 1977. – 725 с.