

**ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ И МНОГОЧАСТИЧНОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ВЫПОЛНЕНИЕ ГИПОТЕЗЫ ДИНАМИЧЕСКОГО
СКЕЙЛИНГА ИЗИНГОВСКОГО НАНОМАГНЕТИКА**

© 2016 г. Ж.В. ДЗЮБА, Д.В. СПИРИН, В.Н. УДОДОВ

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан
e-mail: dudareva82@gmail.com

Уже несколько десятилетий ученые продолжают изучать системы с сильной одноосной анизотропией и слабым межмолекулярным взаимодействием вблизи критической области [1-4].

В статье представлены результаты компьютерного моделирования обобщенной модели Изинга квазиодномерного наномангнетика в магнитном фазовом переходе антиферромагнетик-феромагнетик с периодическими граничными условиями методом Монте-Карло. Изучено влияние внешнего магнитного поля и многочастичного взаимодействия на выполнение гипотезы динамического скейлинга изинговского наномангнетика, а именно выполнения соотношения $Y = \nu^* z$. Для линейной системы (кластера) от 7 до 11 узлов построены температурные зависимости кинетического критического индекса $Y(T)$ и произведения динамического критического индекса на индекс корреляционной длины $\nu^* z(T)$. Описано влияние энергии взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия и напряженности внешнего магнитного поля на выполнение данного соотношения.

Рассмотрим одномерную модель Изинга магнетика, на узлах которого расположены спины, при этом спины имеют два направления по полю или против поля [5]. Важной составляющей частью моделей многих физических систем являются граничные условия, мы рассматривали периодические граничные условия (ПГУ), которые часто используются в физике твердого тела. В этом случае, энергия одномерного ферромагнетика в безразмерных единицах равна [6]

$$E = \frac{\mathcal{E}}{|j_1|} = -H \sum_{i=1}^N S_i \pm \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + S_N S_1 \right) - J_2 \left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} + \sum_{i=1}^2 S_{N-2+i} S_i \right) - J_3 \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} + \sum_{i=1}^3 S_{N-3+i} S_i \right) - J_{1-4} \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+1} S_{i+2} S_{i+3} + S_{N-2} S_{N-1} S_N S_1 + S_{N-1} S_N S_1 S_2 + S_N S_1 S_2 S_3 \right), \quad (1)$$

где E и \mathcal{E} - энергия магнетика в безразмерных и энергетических единицах соответственно, j_1 - энергия взаимодействия между ближайшими соседями, J_2 и J_3 - безразмерные энергии взаимодействия вторых и третьих соседей соответственно, J_{1-4} - безразмерная энергия четырехчастичного взаимодействия, H - безразмерная проекция напряженности внешнего магнитного поля на выбранную ось, N - количество атомов (узлов), i - номер узла, а S_i - некоторая величина, принимающая значение +1 или -1. Если магнитный момент i -го атома сонаправлен с выбранным направлением, то S_i равно +1, если нет, то -1. В данной работе исследуется ферромагнетик, т.е. в формуле (1) перед вторым слагаемым стоит знак «-».

В зависимости от обменных сил одномерный магнетик может находиться как в ферромагнитном состоянии, так в антиферромагнитном или в ферримагнитном состоянии. Это соответствует нескольким различным фазам. В данной работе полагает-

ся, что константа обменного взаимодействия ближайших соседей $J_1 > 0$ и энергия минимальна для спинов, направленных в одну сторону (при учете взаимодействия только ближайших соседей).

Исследовать процесс фазового перехода позволяет метод Монте-Карло [7]. С его помощью можно исследовать различные модели магнетиков, в том числе и нашу. При исследовании динамики модели использовался алгоритм Метрополиса, где одним из ключевых является понятие конфигурации, т. к. именно через неё реализуются ферро- и антиферромагнитная фазы. Конфигурация - это последовательность из N значений S_i . Для ферромагнитной фазы конфигурацией будет являться последовательность из +1 или -1. А для антиферромагнитной - последовательность из чередующихся +1 и -1. Помимо понятия конфигурации в алгоритме Метрополиса также используется величина T - относительная температура. Она связана с абсолютной температурой T_{abc} соотношением [8]:

$$T = \frac{kT_{abc}}{J_1}, \quad (2)$$

где k - постоянная Больцмана, J_1 - энергии взаимодействия в первой координационной сфере. Чем больше температура, тем переход в новое состояние более вероятен.

Как известно для конечных систем границы критической области можно определить путем расчета корреляционной длины, так была рассчитана критическая температура для системы от 7 до 11 узлов при учете энергии взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия и напряженности внешнего магнитного поля. Используя значения критической температуры, а также значения критических индексов [6] было проверено следующее соотношение динамического скейлинга:

$$Y = z \nu. \quad (3)$$

Далее подробно рассмотрим температурную зависимость правой и левой части соотношения (3) для цепочки из 8 узлов для разных значений энергий взаимодействия и внешнего магнитного поля. В одной области было построено две функции: $Y(T)$ и $z * \nu(T)$. Чем ближе кривые находятся друг с другом, тем лучше выполняется соотношение, в свою очередь совпадение кривых означает выполнение гипотезы динамического скейлинга.

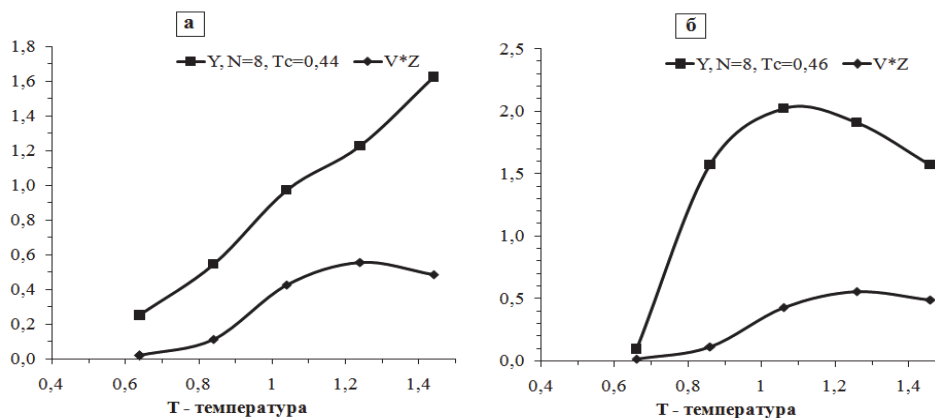


Рис. 1. График зависимости кинетического критического индекса Y и произведения $\nu * z$ от температуры T для размера системы из 8 узлов, энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0,1$ и а) напряженности магнитного поля $H = 0$; б) напряженности магнитного поля $H = 0,1$; относительная погрешность 3-10 %.

Графики зависимости произведения индекса корреляционной длины ν и динамического критического индекса z при учете энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0,1$ для различного значения внешнего магнитного поля представлен на рис. 1. Видно, что кривые $\nu * z$ имеют общий характер, вместе с тем добавление внешнего

магнитного поля увеличивает значения кинетического критического индекса Y и значение произведения индексов v^*z . Так, например, для системы из 8 узлов при учете взаимодействия вторых соседей в нулевом поле, произведения индексов v^*z изменяются от 0,07 до 0,38, а в поле с напряженностью $H = 0,1$ произведение индексов находится в интервале от 0,01 до 0,48, соответственно (рис. 1). В целом можно отметить, что добавление магнитного поля способствует нарушению соотношения динамического скейлинга, на рис. 1, б кривые дальше «разбегаются» друг от друга. Вместе с тем в поле с напряженностью $H = 0,1$, вблизи критической точки $T = 0,66$ соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется.

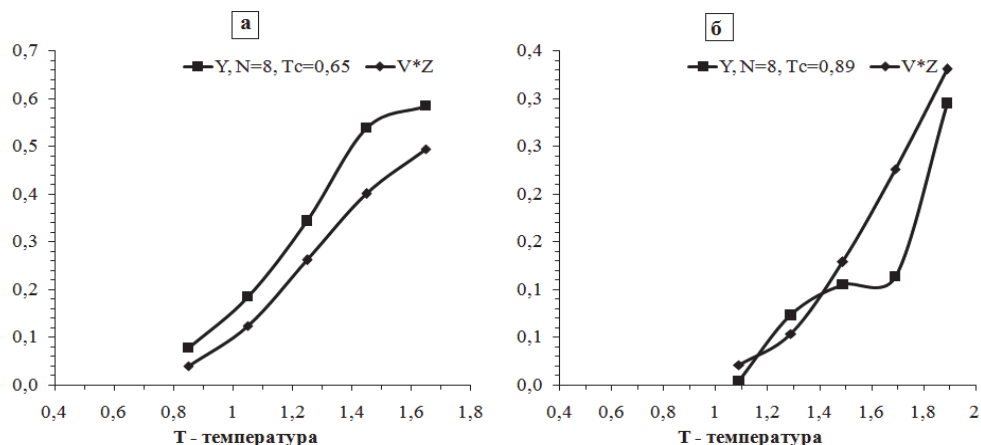


Рис. 2. График зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T для размера системы из 8 узлов, напряженности поля $H = 0$ и а) энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0,5$; б) энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 1$; относительная погрешность 3-10 %.

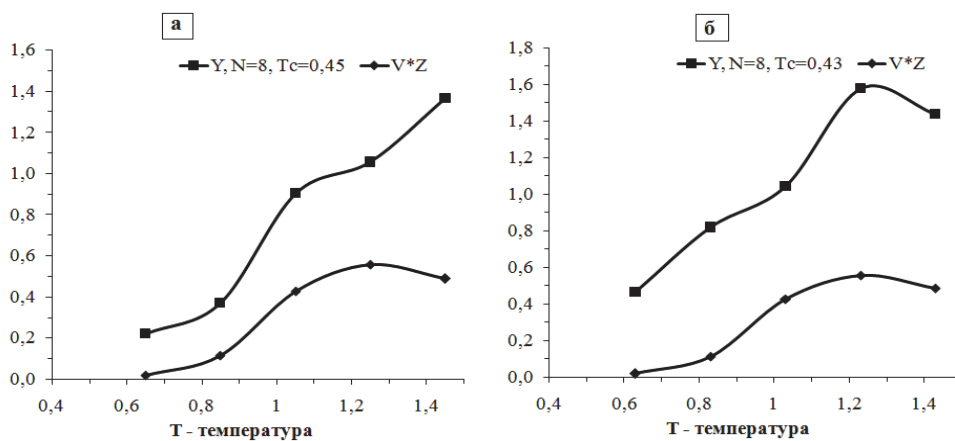


Рис. 3. График зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T для размера системы из 8 узлов, напряженности поля $H = 0$ и а) энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,1$; б) энергии четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0,1$; относительная погрешность 3-10 %.

Интересный результат получен в нулевом магнитном поле для энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0,5$ и $J_2 = 1$ (рис. 2). Увеличение энергии взаимодействия вторых соседей уменьшает значения индексов, вместе с тем соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется в обоих случаях. На рис. 2, б для системы из 8 узлов и напряженности поля $H = 0$ имеются две точки пересечения кривых кинетического критического индекса Y и произведения v^*z , в кото-

рых соотношение выполняется строго при температурах $T = 1,15$ и $T = 1,4$.

Из рис. 3, можно сделать вывод, что учет энергии взаимодействия третьих соседей лучше способствует выполнению соотношения т.к. кривые находятся ближе друг к другу, чем при учете четырехчастичного взаимодействия. Вместе с тем отметим, что энергия четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} увеличивает значения индексов сильнее, чем энергия взаимодействия третьих соседей J_3 .

Таким образом, показано влияние внешнего магнитного поля и энергии взаимодействия вторых J_2 , третьих соседей J_3 , четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} на выполнение гипотезы динамического скейлинга изинговского наномангнетика, а именно выполнения соотношения $Y = \nu * z$. Добавление магнитного поля способствует нарушению соотношения динамического скейлинга. Найдены параметры, при которых соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется $J_2 = 0,5$ и $J_2 = 1$, в нулевом магнитном поле. Учет энергии взаимодействия третьих соседей способствует выполнению соотношения. Сравним наши результаты (с ПГУ) с моделью при граничных условиях «оборванные концы» при фазовом переходе ферромагнетик - антиферромагнетик. В работе [9] автор отмечает, что гипотеза динамического скейлинга, в рамках модели одномерного изинговского магнетика, нарушается при всех рассмотренных внутрицепочечных взаимодействиях и магнитном поле. Лишь в термодинамическом пределе при ненулевом взаимодействии вторых соседей и четырехчастичном взаимодействии гипотеза динамического скейлинга выполняется в пределах погрешности расчета. Еще один автор [10] отмечает, что для перехода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние гипотеза динамического скейлинга неприменима к малым низкоразмерным магнитным системам. Отсюда, можно сделать вывод, что гипотеза динамического скейлинга наиболее точно выполняется в обобщенной модели Изинга квазиодномерного наномангнетика при фазовом переходе антиферромагнетик - ферромагнетик с периодическими граничными условиями в нулевом магнитном поле при учете энергии взаимодействия вторых соседей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров К.С., Федосеева Н.В., Слевакова И.П. Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах. — Новосибирск, 1983.
2. Bogani L., Vindigni A., Sessoli R. & Gatteschi D. Single-chain magnets: Where to from here? Journal of Materials Chemistry №18, 4750–4758 (2008)
3. Levi B.G. A complex symmetry arises at a spin chain's quantum critical point / B.G. Levi // Physics Today. — 2010. — March. P. 13-15.
4. Катанин А.А. Магнитный порядок и спиновые флуктуации в низкоразмерных системах / А.А. Катанин, В.Ю. Ирхин // УФН. — М, 2007, Т.177, №6. — С. 639-662
5. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. // ред. В.Н.Удодов. — Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова. — 2008. — 135 с.
6. Дударева Ж.В., Удодов В.Н., Спиринов Д.В. Динамические критические индексы квазиодномерного изинговского магнетика в нулевом поле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения— 2016, том 13, №2, с. 198-203
7. Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндера. — М.: Мир. — 1982. — 400 с.
8. Ландау Л.Д. Физическая кинетика: Учеб. пособие: Для вузов в 10 т. Т. X. / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. — М.: Физматлит, 2002. — 536 с.
9. Спиринов Д.В. Особенности критической динамики изинговских наноразмерных магнетиков. // Автореф. Кандидата физико-математических наук. — Томск: ИФПМ СО РАН. — 2008. 18 с.
10. Шабунина Е.В. Фазовые диаграммы и критические индексы одномерного изинговского магнетика. // Автореф. Кандидата физико-математических наук. — Томск: ИФПМ СО РАН. — 2013. 21 с.