

ВЛИЯНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В МОДЕЛИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

Д.В. Спирин^{1,2}, А.Н. Таскин¹, В.Н. Удодов²

¹ Хакасский технический институт – филиал ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», г. Абакан

² Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан

В последние десятилетия синтезированы одномерные (квазиодномерные) изинговские магнитные соединения, на которых основаны новые перспективные материалы.

В работе рассмотрены перколяционные эффекты в модели одномерного изинговского магнетика конечного нанометрового размера с граничными условиями – оборванные концы. В модели учтено взаимодействие с внешним магнитным полем, ближнее взаимодействие узлов, взаимодействие вторых и третьих соседей, а также четырехчастичное взаимодействие. Для моделирования фазового перехода использовался алгоритм Метрополиса. Рассмотрены два варианта локализации немагнитной примеси: с подвижными и фиксированными примесями (замороженные примеси). Для подвижных примесей в алгоритм Метрополиса заложена возможность перемещения немагнитных узлов вдоль цепочки. Во втором варианте при формировании начальных конфигураций немагнитные примеси принимают в магнетике случайные постоянные равновероятные позиции. Показано, что наличие немагнитных узлов приводит к ослаблению корреляции внутри цепочки и магнетик разбивается на несколько несвязанных магнитным взаимодействием частей. Доля магнитных атомов, при которой магнетик разбивается на две некоррелирующие части, является аналогом порога протекания в перколяционной задаче узлов. Радиус протекания соответствует самому дальнему ненулевому взаимодействию. В работе показано наличие связи между порогом протекания и зависимостями времени релаксации фазового перехода ферромагнетик – антиферромагнетик от доли немагнитных примесей в модели одномерного изинговского магнетика с фиксированными (замороженными) немагнитными примесями. В случае свободных магнитных примесей показано отсутствие четкой связи между порогом протекания и зависимостями времени релаксации.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, магнитные фазовые переходы, ферромагнетики, антиферромагнетики, одномерные наномагнетики, перколяция.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование низкоразмерного магнетизма – важная задача материаловедения и моделирования наноматериалов. Экспериментальный интерес к этой проблеме связан с необычными магнитными свойствами органических соединений, ферромагнитных пленок, мультислоев и поверхностей, и с другими исследованиями [1, 2]. Особый класс низкоразмерных магнитных систем с локальными моментами – квазиодномерные соединения, содержащие цепочки магнитных атомов со слабым межцепочечным обменом. Экспериментальные измерения в квазиодномерных наномагнетиках представляют большие трудности, что делает необходимым на первом этапе компьютерное моделирование процессов в таких материалах [3, 4].

Интерес к малым системам вызван тем, что наноразмерные системы обладают уникальной структурой и свойствами, многие из которых имеют фундаментальный и практический интерес, а именно, открываются перспективы улучшения существующих и создания принципиально новых конструктивных и функциональных материалов. В наноструктурных материалах часто изменяются фундаментальные,

обычно структурнонечувствительные характеристики, такие как упругие модули, температуры Кюри и Дебая, намагниченность насыщения, а также наблюдаются особенности фазовых превращений [1, 2]. Магнитные свойства наноразмерных материалов не описываются моделями первого приближения (традиционная модель Изинга, Гейзенберга и т.д.). Поэтому в исследованиях наноструктур используются модели, учитывающие усложняющие факторы, присущие реальным системам [3, 4]. Строгое исследование таких моделей на основе микроскопических гамильтонианов методами современной теоретической физики – задача чрезвычайно сложная. К тому же, реальные магнитные материалы содержат немагнитные примеси, что дополнительно усложняет задачу. Все выше перечисленное приводит к необходимости использования методов численного моделирования для исследования, в частности, низкоразмерных магнитных систем [3, 4]. В настоящей работе создана компьютерная модель и изучено влияние немагнитных примесей на критическую динамику квазиодномерного изинговского наномагнетика.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В модифицированной модели одномерного изинговского наномагнетика с граничными условиями – оборванные концы учитываются ближнее взаимодействие (обменный интеграл j_1), взаимодействие вторых (j_2) и третьих соседей (j_3), а также четырехчастичное взаимодействие (j_4). Таким образом, учитываются все возможные магнитные взаимодействия в пределах четырех соседних узлов и гамильтониан имеет вид

$$\varepsilon = -h \sum_{i=1}^N s_i - j_1 \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - j_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - j_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - j_4 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+1} s_{i+2} s_{i+3}, \quad (1)$$

где N – количество узлов в одномерном магнетике (размер системы); i – номер узла; s_i – проекция безразмерного вектора спинового магнитного момента i -го узла на ось z , вдоль которой направлена напряженность внешнего магнитного поля; h – энергия взаимодействия узла с внешним магнитным полем.

Удобно выразить гамильтониан через энергию взаимодействия ближайших соседей $E = \varepsilon/|j_1|$, тогда

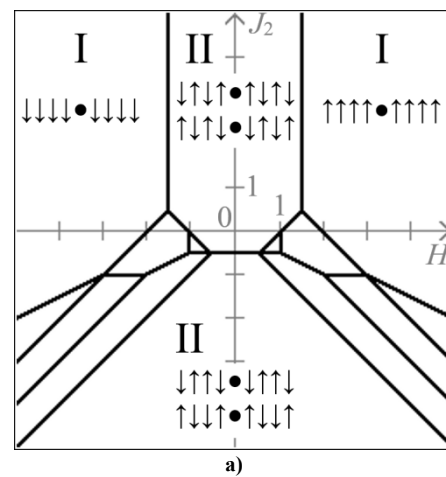
$$E = -H \sum_{i=1}^N s_i \pm \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - J_4 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+1} s_{i+2} s_{i+3}. \quad (2)$$

Если энергия взаимодействия ближайших соседей положительна, то перед вторым слагаемым в гамильтониане ставится знак «-», если отрицательна, то знак «+». В настоящей работе конечное состояние системы соответствует антиферромагнитной фазе ($j_1 < 0$), а начальная ферромагнитная фаза достигается включением большого внешнего магнитного поля ($|H| > 2$). Для моделирования фазового перехода использовался алгоритм Метрополиса [3], который учитывает влияние температуры T на процесс. Удобно использовать приведенную температуру $\Theta = kT/|j_1|$ (k – постоянная Больцмана).

Немагнитные примеси занимают место в узлах и размер системы складывается из количества немагнитных (N_a) и магнитных (N_m) узлов. В модели магнетика с переменной локализацией немагнитной примеси в алгоритм Метрополиса заложена возможность перемещения немагнитных узлов вдоль цепочки. Если по ходу алгоритма случайно выбранный i -й узел является немагнитным, то с вероятностью 0,5 он перемещается влево ($i - 1$) или вправо ($i + 1$) по цепочке. При этом магнитный узел, место которого заняла примесь, перемещается на ее место. Крайние узлы перемещаются только внутрь магнетика.

В модели с фиксированным положением немагнитной примеси при формировании начальных конфигураций для параллельных реализаций алгоритма Метрополиса немагнитные примеси принимают в наномагнетике случайные равновероятные позиции. После этого в течение всего процесса положение примесей не меняется, что соответствует низким температурам («замороженные» примеси). Таким образом, в магнетике изменяются только направления спинов магнитных узлов в соответствии с алгоритмом Метрополиса.

Энергия магнитной конфигурации зависит от расположения немагнитных узлов, следовательно, в модели с фиксированными немагнитными примесями, даже начальные ферромагнитные конфигурации с большой вероятностью не имеют одинаковой энергии. Это приводит к резкому росту вариантов диаграмм основных состояний (без примесей количество вариантов равно единице, с фиксированными примесями – $N!/(N_a! \cdot N_m!)$). На рисунке 1 приведены две диаграммы основных состояний, отличающиеся положением немагнитной примеси на один узел. В связи с резким ростом вариантов количества диаграмм были построены диаграммы основных состояний для наиболее вероятных расположений примесей. Их анализ показал, что фазовый переход ферромагнетик – антиферромагнетик возможен для любого размера системы и количества немагнитных примесей до $N_a = N - 2$.



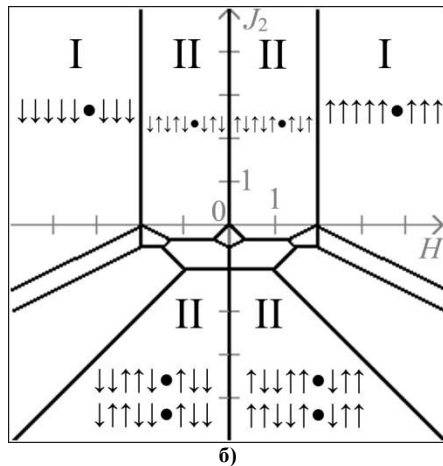


Рис. 1. Диаграммы основных состояний в осях J_2 - H . $N = 9$, $N_a = 1$, $j_1 < 0$, $J_3 = J_{1-4} = 0$; а) примесь занимает пятый узел, б) примесь занимает шестой узел; I – ферромагнитная фаза, II – антиферромагнитная фаза

Учет только ближайшего взаимодействия j_1 соответствует единичному радиусу протекания $R = 1$. При таком радиусе один немагнитный узел разбивает магнетик на две не коррелирующие части, а в теории перколяции – прекращается протекание. Тогда порог протекания N_{ac} , выраженный через количество немагнитных узлов, равен единице ($N_{ac} = 1$). На рисунке 2 представлен график зависимости времени релаксации, выраженного в шагах Монте-Карло, от количества немагнитных узлов для различных размеров магнетика при приведенной температуре 0,5 (модель с фиксированными примесями). При увеличении числа немагнитных узлов время релаксации убывает. На пороге протекания ($N_{ac} = 1$) имеется небольшой излом кривой времени релаксации τ . При увеличении температуры излом становится менее заметным.

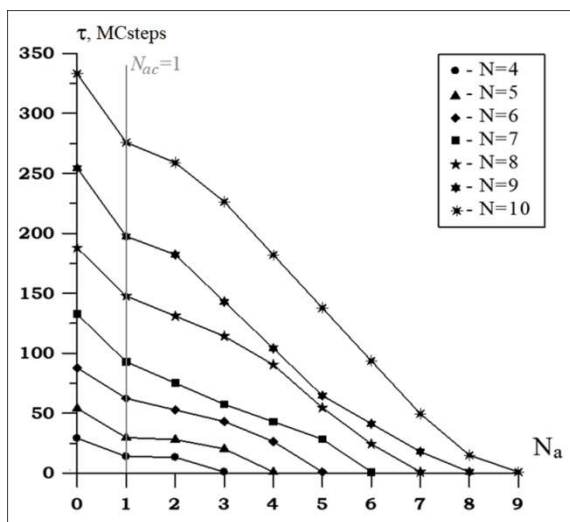


Рис. 2. Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных примесей N_a . $\Theta = 0,5$, $H = 0$, $j_1 < 0$, $J_2 = J_3 = J_{1-4} = 0$

Ненулевая энергия взаимодействия вторых соседей J_2 соответствует радиусу протекания, равному двум. Значения порога, соответствующего такому радиусу протекания, представлены в таблице 1.

Таблица 1. Порог протекания для радиуса, равного двум

N	N_{ac}	N	N_{ac}
4	2,500	8	3,179
5	2,700	9	3,321
6	2,867	10	3,457
7	3,029		

На рисунке 3 значениям порога протекания соответствуют вертикальные линии. Из графика следует, что до порога протекания время релаксации магнитного перехода в модели с фиксированными примесями медленно растет, а после порога быстро убывает, причем близко к порогу наблюдается максимум кривой времени релаксации. Так как взаимодействие ближайших соседей не нулевое, то имеется излом (минимум) времени релаксации и на пороге протекания для $R = 1$.

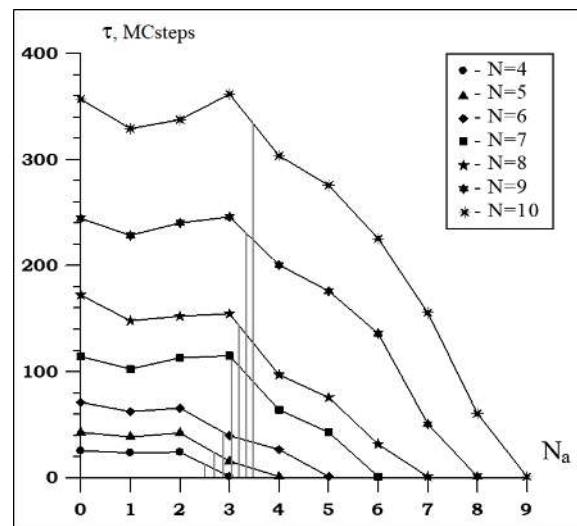


Рис. 3. Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных примесей N_a . $\Theta = 0,5$, $H = 0$, $j_1 < 0$, $J_2 = 0,5$, $J_3 = J_{1-4} = 0$.

Учет взаимодействия третьих соседей и многочастичного взаимодействия соответствует радиусу протекания, равному трем $R = 3$. Соответствующие значения порога представлены в таблице 2, а также отмечены на рисунке 4 вертикальными линиями.

Табл. 2. Порог протекания для радиуса протекания, равного трем

N	N_{ac}	N	N_{ac}
4	3,500	8	4,857
5	3,900	9	5,155
6	4,200	10	5,448
7	4,543		

Как в случае ненулевого взаимодействия третьих соседей (рис. 3), так и в случае ненулевого

многочастичного взаимодействия влияние немагнитных примесей на зависимость времени релаксации

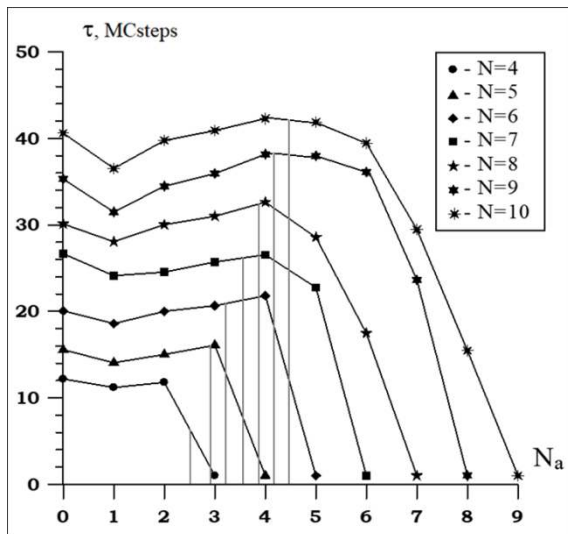


Рис. 4. Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных примесей N_a
 $\Theta = 1, H = 0, j_1 < 0, J_3 = 0,3, J_2 = J_{1-4} = 0$

гично учету взаимодействия вторых соседей – имеется излом кривой времени релаксации и на пороге протекания для $R = 1$ (так как $j_1 < 0, |j_1| > J_3$ и $|j_1| > J_{1-4}$). Далее при увеличении размеров магнетика время релаксации медленно растёт и после порога протекания для $R = 3$ быстро убывает. Отметим, что для четырехчастичного взаимодействия рост времени релаксации до порога выражен слабее.

Для определения возможности перехода ферромагнетик – антиферромагнетик в модели наномангнетика с подвижными примесями, а также для определения начальных конфигураций в алгоритме Метрополиса были построены диаграммы основных состояний. Из них следует, что такой переход возможен, при любом числе немагнитных узлов до $N_a \leq N-2$. Наличие одного немагнитного узла увеличивает количество областей (фаз) на диаграммах, но дальнейшее увеличение числа немагнитных узлов приводит к уменьшению количества фаз.

При подвижных примесях и учёте только ближайшего взаимодействия j_1 для общего количества узлов больше семи и приведённой температуры больше единицы на графике зависимости времени релаксации от количества немагнитных примесей вблизи порога имеется минимум. Для количества узлов меньше семи имеющийся на кривой максимум смещается влево и подавляет минимум.

Учет взаимодействия вторых соседей ($J_2 \geq 0,5$) приводит к отсутствию минимумов в зависимостях времени релаксации от количества подвижных примесей. Кривые времени релаксации имеют максимум в окрестности порога протекания, но

точного соответствия между положением максимума и порогом протекания не наблюдается. Подобные слабые перколяционные эффекты наблюдаются при учете энергии взаимодействия третьих соседей и многочастичного взаимодействия. Таким образом, для подвижных примесей, что соответствует достаточно высоким температурам, перколяционные эффекты, связанные с немагнитными примесями, выражены гораздо слабее, чем для «замороженных» примесей. Расчеты проводились для приведенной температуры до $\Theta = 2$, следует заметить, однако, что из-за значений обменного интеграла (магнитная энергия взаимодействия ближайших соседей) даже одинаковая приведенная температура для подвижных примесей может соответствовать значительно более высоким температурам, чем для «замороженных» примесей. И последнее замечание. Такая «высокая» температура $\Theta = 2$ не приводит к плавлению кристалла, поскольку стабильность решетки обеспечивается, в основном, значительно более мощными электрическими силами (которые в явном виде не учитываются в нашей модели). $\Theta = 2$ может соответствовать температурам 30-60 К.

Остановимся на выборе максимального размера рассмотренных моделей из 10 узлов. Это ограничение не является принципиальным. При большем размере модели результаты по времени релаксации принципиально не изменятся, однако на диаграммах основных состояний возникнет много «экзотических» фаз, которые пока не наблюдаются экспериментально. Поэтому на данном этапе логично ограничиться 10 узлами. Подчеркнем также, что при моделировании учитываются все возможные конфигурации, то есть задача в рамках модели со сложным взаимодействием решается строго.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование диаграмм основных состояний модельного одномерного изинговского наномангнетика с учетом немагнитных примесей показало, что переход ферромагнетик – антиферромагнетик возможен при любом числе немагнитных примесей до $N_a \leq N-2$, причём как для модели с фиксированными (замороженными) примесями, так и для модели с подвижными примесями.

При фиксированном положении примесных атомов, что соответствует низким температурам, в одномерном изинговском наномангнетике проявляются перколяционные эффекты. При всех рассмотренных взаимодействиях время релаксации до порога протекания, соответствующего наибольшему радиусу протекания, растет, а после порога убывает. Что говорит о разной динамике фазового магнитного перехода до порога протекания и после (при большой концентрации немагнитных примесей).

В модели одномерного изинговского наномангнетика с перемещающейся немагнитной примесью перколяционные эффекты при значительном влиянии примесей на время релаксации проявляются слабо и неоднозначно.

Выражаем благодарность Рецензенту за замечания, которые способствовали улучшению статьи.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта №18-41-190003.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Носкова, Н.И. Субмикроструктурные и нанокристаллические металлы и сплавы [текст] / Н.И. Носкова, Р.Р. Мулюков. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 279 с.
2. Ермаков, А.Е. Структура и магнитные свойства нанокристаллического антиферромагнетика CuO и NiO / А.Е. Ермаков, А.А. Мысик, А.В. Королёв // Проблемы нанокристаллических материалов. – 2002. – С. 380–390.
3. Дзюба, Ж.В. Влияние взаимодействия на критический индекс теплоемкости 1D изинговского ферромагнетика, замкнутого в кольцо / Ж.В. Дзюба, Д.В. Спирин, Удодов В.Н. // Письма о материалах. – 2017. – Т.7, № 3, С. 303–306.
4. Дзюба, Ж.В. Критический индекс восприимчивости 1D-изинговского ферромагнетика, замкнутого в кольцо / Ж.В. Дзюба, В.Н. Удодов // Физика твердого тела. – 2018. – Т.60. – вып. 7. – С. 1318-1320. DOI: 10.21883/FTT.2018.07.46115.238

Спирин Дмитрий Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики, математики и естественнонаучных дисциплин, Хакасский технический институт – филиал Сибирского федерального университета, доцент кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (3902) 225355, e-mail: dvspirini@mail.ru.

Таскин Андрей Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики, математики и естественнонаучных дисциплин, Хакасский технический институт – филиал Сибирского федерального университета, (3902) 225355, e-mail: mied2011@mail.ru.

Удодов Владимир Николаевич – доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры производственных технологий и техносферной безопасности, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, 8(923)395-62-52. e-mail: udodov@khsu.ru.

INFLUENCE OF PERCOLATION EFFECTS ON RELAXATION PROCESSES IN MODEL OF QUASI-ONE-DIMENSIONAL ISING MAGNETICS

D.V. Spirin^{1,2}, A.N. Taskin¹, V.N. Udodov²

¹ *Khakas technical institute – affiliate of Siberian federal university, Abakan.*

² *Katanov Khakas state university, Abakan.*

In recent decades, one-dimensional (quasi-one-dimensional) Ising magnetic compounds have been synthesized, on which new promising materials are based.

Percolation effects are considered in the model of a one-dimensional Ising magnet of finite nanometer size with boundary conditions - dangling ends. The model takes into account interaction with an external magnetic field, near-site interaction of nodes, interaction of second and third neighbors, as well as four-particle interaction. To model the phase transition, the Metropolis algorithm was used. Two options for the localization of a nonmagnetic impurity are considered: with mobile impurities and with fixed impurities (frozen impurities). For mobile impurities, the Metropolis algorithm contains the possibility of moving non-magnetic nodes along the chain. In the second variant, when the initial configurations are formed, nonmagnetic impurities in the magnet take random constant equiprobable positions. It is shown that the presence of non-magnetic nodes leads to a weakening of the correlation inside the chain and the magnet breaks up into several parts unconnected by magnetic interaction. The fraction of nonmagnetic atoms, in which the magnet is divided into two non-correlating parts, is an analogue to the percolation threshold in the percolation site problem. The percolation radius corresponds to the farthest nonzero interaction. The paper shows the existence of a relationship between the percolation threshold and the dependences of the relaxation time of the ferromagnet - antiferromagnet phase transition on the fraction of nonmagnetic impurities in the model of a one-dimensional Ising magnet with fixed (frozen) nonmagnetic impurities. In the case of mobile magnetic impurities, the absence of a clear connection between the percolation threshold and the dependences of the relaxation time is shown.

Index terms: *computer modelling, magnetic phase transitions, ferromagnets, antiferromagnets, one-dimensional nanomagnets, percolation.*

REFERENCES

1. Noskova, N.I. and R.R. Mulykov. Submicrocrystalline and nanocrystalline metals and alloys. Yekaterinburg: Ural Branch of RAS, 2003.
2. Ermakov, A.E., A.A. Mysik and A.V. Korolev. "Structure and magnetic properties of the nanocrystalline antiferromagnet CuO and NiO", *The problems of nanocrystalline materials*, pp. 380–390, 2002.
3. Dzyuba, Zh.V., D.V. Spirin and V.N. Udodov "Effect of Interaction on the Critical Exponent of Heat Capacity of 1D Ising Ferromagnet Closed in a Ring". *Letters on Materials*, vol. 7, no. 3, pp. 303–306, 2017.
4. Dzyuba, Zh.V. and V.N. Udodov. "Susceptibility Critical Exponent of a 1D Ising Ring-Type Ferromagnetic". *Physics of the Solid State*, vol. 60, pp. 1323–1325, 2018.

Spirin Dmitriy Vladimirovich – candidate of physical and mathematical sciences, associate professor at the chair applied informatics, mathematics, and natural sciences, Khakas technical institute – affiliate of Siberian federal university, associate professor at the chair Computer Software and Automated Systems, Katanov Khakas state university (3902) 225355, e-mail: dvspirini@mail.ru.

Taskin Andrey Nikolaevich – candidate of physical and mathematical sciences, associate professor at the chair applied informatics, mathematics, and natural sciences, Khakas Technical Institute – affiliate of Siberian Federal University, (3902) 225355, e-mail: mied2011@mail.ru.

Udodov Vladimir Nikolaevich – doctor of physical and mathematical sciences, professor at the production technology and technosphere security, Katanov Khakas State University, +7(3902)222432, e-mail: udodov@khsu.ru.