

УДК 239.2

МОДУЛИРОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ В МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ

А. К. Муртазаев^{1,2}, Ж. Г. Ибаев¹, Я. К. Абуев¹,
Р. А. Муртазалиев², Т. А. Тааев¹, Д. Р. Курбанова¹, Н. А. Магомедов¹

¹ Институт физики им. Х.А. Амирханова ДНЦ РАН
² Дагестанский государственный университет

Проведены исследования термодинамических свойств наночастиц с модулированным магнитным упорядочением методами Монте-Карло. Получены температурные зависимости основных термодинамических параметров. Показано, что наличие свободной поверхности приводит к смещению температур фазовых переходов и сложной зависимости термодинамических параметров от температуры. В наночастицах модулированное упорядочение возможно при достаточно больших линейных размерах.

Thermodynamic properties of nanoparticles with magnetic modulated ordering are studied by the Monte-Carlo method. Temperature dependences of the main thermodynamic parameters are obtained. Presence of the free surface is shown to lead to the shift in phase transition temperatures and to the complex dependency of thermodynamic parameters on temperature. In nanoparticles the modulated ordering is possible at sufficiently large linear sizes.

Ключевые слова: наночастицы; модулированное упорядочение; ANNNI-модель; метод Монте-Карло.

Keywords: nanoparticles; modulated ordering; ANNNI-model; Monte-Carlo method.

Введение

Основные фундаментальные явления физики конденсированных сред (электропроводность, магнетизм, фазовые переходы и др.) представляют собой результат коллективных взаимодействий атомов, находящихся в тесном контакте. В этой связи актуальными являются вопросы о том, с какой скоростью нарастает и на каком этапе объединения атомов завершается формирование того или иного свойства массивного кристалла. Особые физические свойства небольшой совокупности атомов представляют значительный научный и прикладной интерес, поскольку эти свойства являются промежуточными между свойствами изолированных атомов и твердого тела.

По характеру упорядочения наночастицы магнетиков можно разделить на те же классы, что и массивные материалы (ферромагнетики, антиферромагнетики и т.д.). Модулированное упорядочение образуется в системах с конкуренцией обменного взаимодействия частиц системы независимо от физической или химической природы этого взаимодействия [1]. Мезомасштабные периодические структуры, возникающие в этих системах, определяют некоторые способы их технологического применения, например, в качестве термопластических эластомеров и шаблонов наноструктур. Благодаря интенсивному исследованию наночастиц в настоящее время накоплен значительный объем экспериментальной информации. Теоретическая интерпретация этой информации осложняется рядом причин. С одной стороны, обычные квантовые методы оказываются неприменимыми к системам, содержащим сотни атомов, если не прибегнуть к существенным приближениям и допущениям. С другой стороны, к наносистемам неприменима и макроскопическая термодинамика из-за невозможности разделения объемных и поверхностных свойств. Следовательно, наиболее надежное предсказание свойств таких систем пока дают только машинные расчеты методами молекулярной динамики и Монте-Карло [2, 3].

Модель

Хорошо известной моделью статистической физики, применяемой для исследования систем с модулированным упорядочением, является анизотропная

модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель). ANNNI-модель (рис. 1) описывается гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j + J_1 \sum_i s_i s_{i+2}, \quad (1)$$

где $J > 0$ - параметр ферромагнитного взаимодействия ближайших пар спинов, $J_1 < 0$ - параметр конкурирующего взаимодействия спинов, следующих за ближайшими вдоль оси Z , $s_i = \pm 1$.

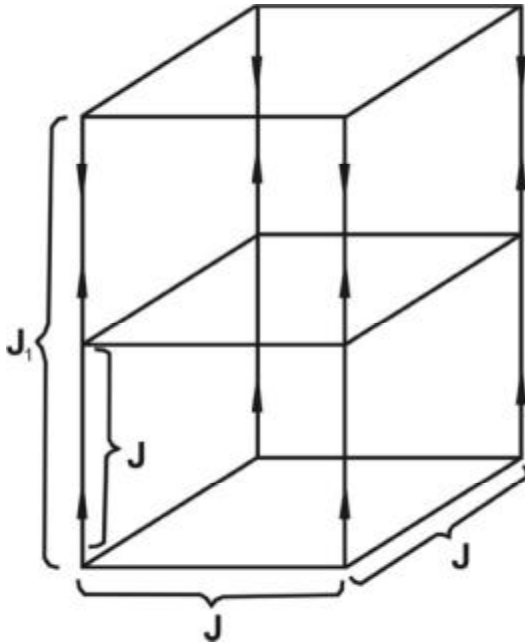


Рис. 1. ANNNI-модель

Для описания фазового поведения ANNNI-модели были использованы различные теоретические методы, включая высоко- и низкотемпературные разложения, теорию среднего поля и т.д. Важной особенностью ANNNI-модели является точка Лифшица, разделяющая линию фазовых переходов второго рода с различным характером критического поведения (рис. 2). Критическое поведение до этой точки характеризуется изинговским классом универсальности, а после XY классом универсальности критического поведения [4-6].

Моделирование методом Монте-Карло проведено в основном для макроскопических систем как в области перехода «ферромагнетик - парамагнетик», так и в модулированной области [7]. По результатам этих исследований построена фазовая диаграмма для макроскопических систем, качественно согласующаяся с диаграммой полученной другими методами [8].

Исследование влияния свободной поверхности на свойства модулированного упорядочения наномгнитных систем методами Монте-Карло, насколько нам известно, до сих пор ни кем не проводилось.

Метод исследования

Для изучения температурных зависимостей термодинамических и магнитных характеристик рассматриваемых систем нами использован классический алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло. Наночастицы с модулированными структурами получены с помощью анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями без периодических граничных условий.

Свойства модулированных структур изучались с помощью величины представляющей собой усредненную намагниченность слоя перпендикулярного оси Z [7]:

$$M_z = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{i=1}^{L_x} \sum_{j=1}^{L_y} S_{ij}. \quad (2)$$

Теоретически эти структуры можно описать с помощью гармонических функций синуса или косинуса:

$$M_z = A \cos(2pkz + j), \quad (3)$$

где A - амплитуда, k - волновое число и ϕ - начальная фаза. Статистические флуктуации, возникающие в системе при моделировании, приводят к тому, что амплитуда не имеет строго определенного значения для всей модулированной структуры. Поэтому

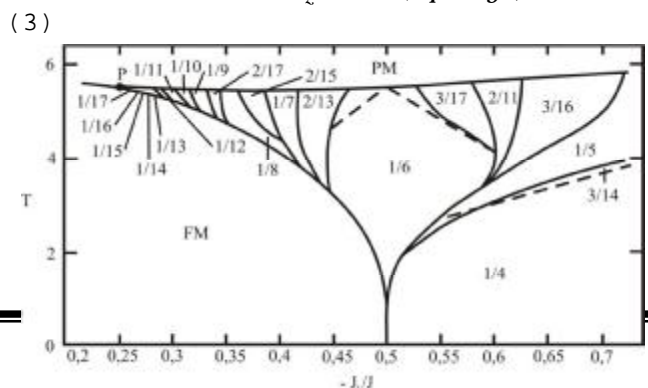


Рис. 2. Фазовая диаграмма ANNNI-модели

значение амплитуды A можно определить как арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |A_i|, \quad (4)$$

максимальных и минимальных значений амплитуд A_i волновой структуры по всей длине образца, n – число полуволн укладываемых на длине образца.

При описании термодинамических и магнитных свойств системы с модулированным упорядочением невозможно использовать обычные параметры порядка (намагниченность, вектор антиферромагнетизма и т.д.), поскольку они обращаются в нуль в модулированной фазе. Поэтому в качестве параметра порядка m используем величину, определяемую формулой (4), т.е. $m \propto A$ [9].

Вычисление термодинамических параметров проводилось по следующим формулам [10]:

$$c = (NK) \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), \quad (5)$$

$$c = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (6)$$

где χ – восприимчивость, C – теплоемкость, N – число частиц в системе, $K = |J|/k_B T$, U – внутренняя энергия.

Анализ характера фазовых переходов, определение температур переходов, особенностей поведения вблизи точки фазового перехода проведены на основе изучения температурных зависимостей параметра порядка, восприимчивости и теплоемкости. Для вычисления параметров модулированной фазы использованы формулы преобразования Фурье.

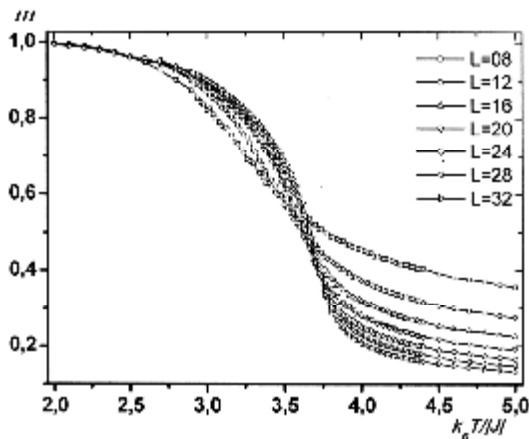


Рис. 3. Температурная зависимость параметра порядка при $|J_1/J| = 0.6$

Результаты и обсуждение

Исследования выполнены для наночастиц кубической формы при $|J_1/J| = 0.2, 0.3, 0.4, 0.6$ и линейных размерах системы $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32$. Расчеты проводились вдоль марковской цепи длиной $\tau = 100\tau_0$ ($\tau_0 = 10^5$ МКшагов/спин – неравновесный участок цепи, который отбрасывается).

Для указанных значений $|J_1/J|$ получены зависимости основных термодинамических параметров от температуры при различных линейных размерах системы. Полученные результаты показывают, что рассматриваемые наночастицы испытывают

фазовый переход из упорядоченного состояния в разупорядоченное при $|J_1/J| = 0.2$. Модулированное упорядочение наблюдается для $|J_1/J| > 0.2$ при достаточно больших линейных размерах системы $L > 16$. Температурные зависимости параметров порядка (рис. 3) демонстрируют характерные для фазовых переходов спады. По рис. 3 видно, что с уменьшением линейных размеров поведение характерное для классического параметра порядка размывается.

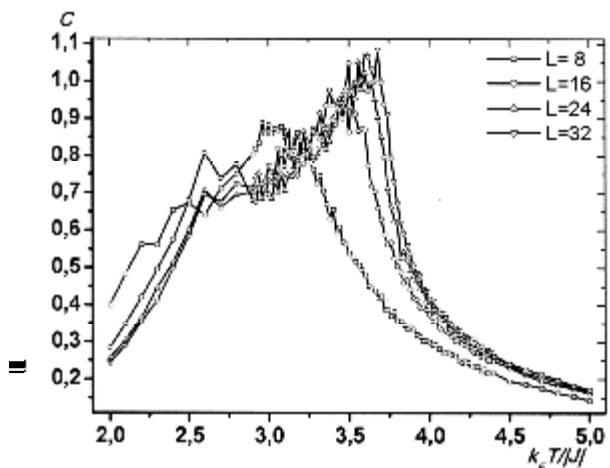
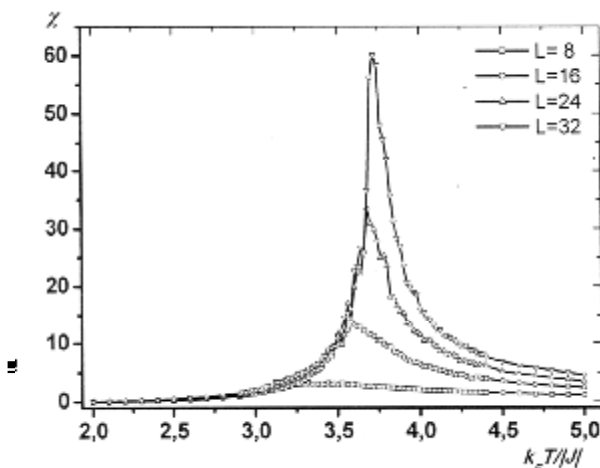


Рис. 4. Зависимость восприимчивости от температуры при $|J_1/J| = 0.6$

Рис. 5. Зависимость теплоемкости от температуры при $|J_1/J| = 0.6$

Для восприимчивости (рис. 4.) характерны максимумы, величина и положение которых также зависят от линейных размеров системы (с уменьшением L величина максимума уменьшается и его положение смещается в сторону малых значений температуры). Наиболее интересными являются температурные зависимости теплоемкости (рис. 5). Эти зависимости демонстрируют необычное для классических систем поведение. Для систем с большими линейными размерами ($L > 16$) проявляется несколько пиков, расположенных между двумя основными максимумами, которые характеризуют переход из однородного состояния в модулированное и из модулированного в парамагнитное. Все остальные небольшие пики, расположенные между этими двумя, ответственны за переходы между различными модулированными структурами. Эти пики проявляются не только при переходах между модулированными структурами с разными волновыми числами, но и при переходах между структурами с одинаковым волновым вектором, но разной фазой. Положение всех пиков также зависит от линейных размеров системы. С уменьшением линейных размеров величина и количество пиков уменьшается, постепенно сливаясь в один широкий максимум в виде колокола (например, для самой маленькой системы с $L = 8$, рис. 4). Подобное поведение можно объяснить наличием большого числа несвязанных спинов в поверхностном слое, и доля таких спинов возрастает с уменьшением размеров частицы. Большие флуктуации слабо связанных поверхностных спинов приводят к размытию всех переходов в системе и приближают его к суперпарамагнитному состоянию.

Таким образом, для наночастиц с модулированным упорядочением наблюдается довольно сложная, но интересная картина термодинамического поведения в области фазовых переходов. И это поведение можно объяснить наличием большого количества слабо связанных поверхностных спинов препятствующих упорядочению системы даже при довольно низких значениях температуры.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.1092, грантов РФФИ (12-02-96504, 12-02-31428, 13-02-00220).

ЛИТЕРАТУРА

1. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке // УФН. 2008. Т. 178. С. 1001-1006.
2. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Aliev Kh.K. Finite-size scaling and critical exponents of the real antiferromagnetic model // J. Magn. Magn. Mater. 1999. Vol. 204. P. 151-158.
3. Murtazaev A.K., Ibaev J.G. Critical properties of an ANNNI-model in the neighborhood of multicritical Lifshitz point // Sol. State Commun. 2012. Vol. 152. P. 177-179.
4. Муртазаев А.К., Ибаев Ж.Г. Критические свойства анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями // ЖЭТФ. 2011. Т. 140, вып. 1 (7). С. 123-130.
5. Murtazaev A.K., Ibaev J.G. Investigation of multicritical phenomena in complex models of magnetics by Monte-Carlo methods // Sol. State Phenom. 2012. Vol. 190. P. 391-395.
6. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.М. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 241 с.
7. Муртазаев А.К., Ибаев Ж.Г. Исследование анизотропной модели Изинга методом Монте-Карло // ФНТ. 2009. Т. 35. С. 1011-1016.
8. Selke W. The ANNNI model - Theoretical analysis and experimental application // Phys. Rep. 1988. Vol. 170. P. 213-264.

9. Муртазаев А.К., Ибаев Ж.Г. О выборе параметра порядка модулированных магнитных структур // ЖЭТФ. 2013. Т. 143. С. 106-112.

10. Peszak P., Ferrenberg A. M., Landau D.P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 43. P. 6087-6093.

Поступила в редакцию 20.06.2013 г.

Принята к печати 30.09.2013 г.