

УДК 239.2

МАГНИТНЫЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАЛЫХ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ С ФРУСТРАЦИЯМИ

А. К. Муртазаев^{1,2}, М. К. Рамазанов¹,
М. К. Бадиев¹, Д. Р. Курбанова¹, Я. К. Абуев¹

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН

²Дагестанский государственный университет

Методом Монте-Карло на основе высокоэффективного репличного алгоритма проведено исследование модели наноструктур магнитных материалов с фрустрациями. Построены температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и параметра порядка для частиц со свободными границами. Определены значения критических температур. На основе гистограммного метода обработки данных показано, что в исследуемой модели малых магнитных частиц наблюдается фазовый переход второго рода.

The model of nanostructures of magnetic materials with frustrations has been investigated by the Monte Carlo method on basis of highly effective replica algorithm. Temperature dependences of the specific heat, susceptibility and the order parameter for particles with free boundaries are presented. Values of critical temperatures are determined. Based on the histogram data processing method it is shown that in the investigated model of small magnetic particles there is a phase transition of the second order.

Ключевые слова: метод Монте-Карло; репличный алгоритм; малые магнитные частицы; фазовый переход.

Keywords: Monte Carlo method; replica algorithm; small magnetic particles; phase transition.

Введение

Количественное описание магнитных, термодинамических и критических свойств в различных решеточных системах до сих пор остается одной из наиболее актуальных задач современной физики конденсированного состояния. В последние годы для изучения магнитных и термодинамических свойств, а также описания критического поведения решеточных систем, в которых возможен фазовый переход второго рода, используют модели Изинга, Гейзенберга и XY-модель, а также различные их модификации. На основе этих моделей с помощью метода Монте-Карло (МК) получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком интервале температур [1]. Исследования выполнены на решетках различного типа и пространственной размерности с учетом большого количества различных параметров.

При этом в основном изучались простые ферромагнитные модели с взаимодействием между ближайшими соседями [2]. Значительно меньше исследованы спиновые системы с фрустрациями. Обычно при исследовании магнитных и термодинамических свойств методами МК стараются уменьшить степень влияния поверхности и на систему накладывают различные периодические граничные условия [2].

В данной работе исследуется влияние свободных граничных условий на магнитные и термодинамические свойства малых магнитных частиц с фрустрациями. Эффекты фрустрации очень чувствительны при исследовании термодинамических свойств вблизи критической точки, особенно для систем со свободными граничными условиями. Кроме того, исследование магнитных и термодинамических свойств в системах без периодических граничных условий в наносистемах и малых магнитных частицах, в которых спины находятся в иных условиях, чем объемные, представляют отдельный интерес [3, 4]. Известно, что эффекты фрустраций, обусловленные либо конкуренцией обменных взаимодействий, либо геометрией решетки, играют важную роль в различных магнитных системах [5].

Отметим, что исследований влияния фрустраций на магнитные и термодинамические свойства наносистем и на природу фазовых переходов

практически не проводилось. В связи с этим нами сделана попытка исследовать природу фазовых переходов и сравнения термодинамических параметров малых магнитных частиц с параметрами «бесконечных систем» (с периодическими граничными условиями).

Модель и метод исследования

Исследование спиновых систем с фрустрациями традиционными методами сталкивается с большими трудностями. Строгое исследование фрустрированных магнитных систем на основе микроскопических гамильтонианов методами современной теоретической физики – задача чрезвычайно сложная. Это привело к тому, что магнитные и термодинамические свойства в таких системах интенсивно исследуются методами МК [6–14]. Методы МК позволяют строго и с контролируемой погрешностью исследовать обще термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности.

Исследование магнитных и термодинамических свойств малых магнитных частиц с фрустрациями вблизи критической области обычными методами МК сталкивается с серьезными и труднопреодолимыми проблемами. Это связано с тем, что для фрустрированных систем характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Поэтому нами использовался репличный обменный алгоритм метода МК, который является наиболее мощным и эффективным в исследовании физических свойств фрустрированных систем. Более подробно этот алгоритм описан в работе [8].

Методом МК на основе репличного алгоритма нами выполнены исследования магнитных и термодинамических свойств наноструктур магнитных веществ с фрустрациями на слоистой треугольной (гексагональной) решетке с взаимодействиями ближайших соседей на основе трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.

Рассматриваемая система описывается следующим гамильтонианом [15]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j), \quad (1)$$

где \hat{S}_i – трехкомпонентный единичный вектор $\hat{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$, $J < 0$ – константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Взаимодействие всех ближайших соседей берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями. Магнитные моменты, находящиеся в вершинах правильных треугольников, не могут образовать обычную коллинеарную структуру. Минимум классической обменной энергии достигается при условии, что соседние спины ориентированы под углом 120° друг к другу. Такое состояние является вырожденным. Антиферромагнитное взаимодействие между плоскостями в реальных гексагональных кристаллах не нарушает эту структуру, упорядочивая спины в соседних плоскостях антипараллельно [16].

Исследование фазовых переходов и критических свойств этой модели с периодическими граничными условиями нами были проведены в работе [6, 17], где продемонстрировано наличие фазового перехода второго рода для решеток малых размеров и псевдоуниверсальное критическое поведение.

В данной работе для проведения расчетов формировались системы кубической формы со свободными границами с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 9+30$, где L – линейный размер решетки, который измеряется в единицах межатомных расстояний. Эффективное число спинов в системах составляло $N_{eff} = 729+27\ 000$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4.0 \times 10^5$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$.

Результаты исследования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости C и восприимчивости χ нами использовались выражения [18, 19]:

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

$$c = \begin{cases} (NK) \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right) & T < T_N \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (3)$$

где $K = |J|/k_B T$, N – число частиц, U – внутренняя энергия, m – магнитный параметр порядка.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле [20]:

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle} / 3, \quad (4)$$

где M_A , M_B и M_C – намагниченности трех подрешеток.

Намагниченность подрешетки определялась следующим образом [14]:

$$\langle M_r \rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, \quad r = A, B, C. \quad (5)$$

На рис. 1 представлены зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для систем с линейными размерами $L = 9; 12; 18; 24; 30$.

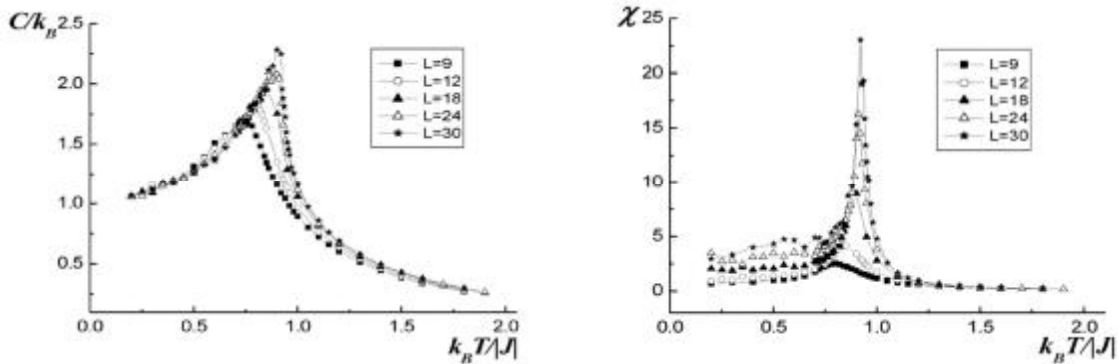


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B и восприимчивости χ

Отметим, что температурные зависимости C и χ для всех систем имеют хорошо выраженные максимумы в критической области, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе. Известно, что критическая температура T_N для малых систем смещается в сторону более низких температур по сравнению с «макросистемами». На рис. 1 наблюдается четко выраженное смещение максимумов C и χ с изменением N .

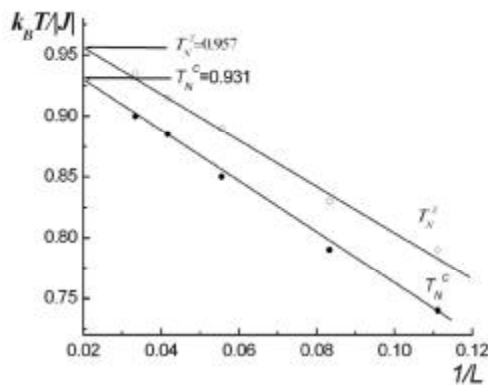


Рис. 2. Зависимость критической температуры от линейных размеров

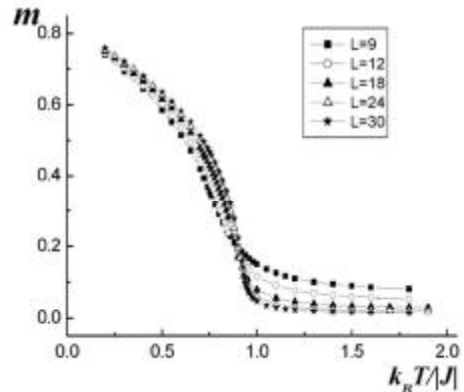


Рис. 3. Температурная зависимость параметра порядка m

На рис. 2 представлены данные о зависимостях критических температур T_N^c и $T_N^{c'}$ от линейных размеров частицы L , которые определены по максимумам теплоемкости и восприимчивости. Как видно из рисунка, с увеличением размеров частиц температуры, соответствующие максимумам теплоемкости и восприимчивости,

смещаются в сторону более высоких, т.е. температура фазового перехода возрастает. При этом температуры фазовых переходов, определенные по максимумам теплоемкости и восприимчивости, различны. Не совпадают и предельные значения температур, на которые приходятся максимумы теплоемкости и восприимчивости при $L \rightarrow \infty$ в наших данных. Отметим, что критическая температура, определенная по максимумам восприимчивости, в пределах погрешности совпадает со значением критической температуры $T_N = 0.957(1)$, определенным нами для аналогичной модели с периодическими граничными условиями в работе [21]. Обращает на себя внимание и тот факт, что при $L \rightarrow \infty$ температуры максимумов теплоемкости и восприимчивости проявляют лишь слабую тенденцию к сближению в пределах рассматриваемых нами значений L .

Температурные зависимости параметра порядка для систем с различными линейными размерами показаны на рис. 3. На этом рисунке хорошо наблюдаются остаточные высокотемпературные значения намагниченности, которые уменьшаются с увеличением линейных размеров решетки. Отметим, что эти величины не удобны для исследования методами МК, так как вблизи критической температуры намагниченность имеет высокотемпературные «хвосты», а восприимчивость – сильно флуктуирующая величина. Важным и существенным является вопрос о роде фазового перехода в наночастицах магнитных материалов. Для прояснения этого вопроса в нашем случае была проведена специальная серия исследований. Например, на рис. 4 показана гистограмма распределения энергии вблизи «критической» температуры. Характер распределения энергии и ряд других данных свидетельствуют о том, что в рассматриваемой модели наблюдается фазовый переход

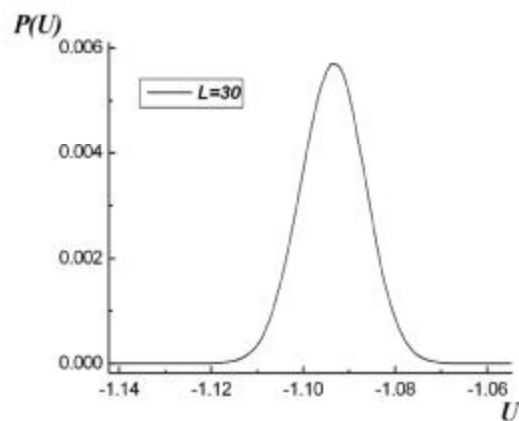


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $L = 30$, $T = 0.957$

второго рода. Более подробно гистограммный метод обработки данных и техника определения рода фазового перехода приведено нами в работе [22].

Заключение

В этой работе мы представили результаты компьютерного моделирования малых магнитных частиц, проведенного с использованием антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. Показано, что в исследуемой модели со свободными граничными условиями наблюдается «фазовый переход» второго рода.

Показано различие, выходящее за пределы погрешности в значениях «критических» температур, определенных по максимумам теплоемкости и восприимчивости. Установлено, что предельное значение T_N при $L \rightarrow \infty$ для значений, полученных по данным восприимчивости, практически полностью совпадает с T_N , полученным для макросистем (для систем с периодическими граничными условиями). Полученные данные хорошо демонстрируют особенности и степень влияния доли поверхностных спинов на термодинамические свойства наночастиц магнетиков с фрустрациями.

Исследование выполнено при поддержке гранта Минобразования по ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы, соглашение №14.В37.21.1092, грантов РФФИ № 13-02-00220, № 12-02-95604-р-юг-а и гранта Фонда Гаджи Махачева по поддержке молодых ученых.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 144 с.
2. Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике // М.: Мир, 1982. 400 с.
3. Петров Ю.И. Физика малых частиц. М.: Наука, 1982. 360 с.
4. Binder K., Hohenberg P.C. Surface Effects on Magnetic Phase Transitions // Phys. Rev. B. 1974. Vol. 9. P. 2194–2214.

-
-
5. Гехт Р.С. Магнитные структуры и свойства состояний в сильно фрустрированных гейзенберговских антиферромагнетиках // ЖЭТФ. 1992. Т. 102, № 6(12). С. 1968–1975.
 6. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. Исследование критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке // ФТТ. 2011. Т. 53. С. 1004–1008.
 7. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами Монте-Карло // ФНТ. 2009. Т. 35, № 7. С. 663–669.
 8. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K. Critical properties of the three-dimensional frustrated Heisenberg model on a layered-triangular lattice with variable interplane exchange interaction // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. P. 174421–174426.
 9. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiiev M.K. Static critical behavior of 3D frustrated Heisenberg model on stacked triangular lattice with variable interlayer exchange coupling // JETP. 2007. Vol. 105, N 5. P. 1011–1017.
 10. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Ramazanov M.K. Static critical behavior of the 3D frustrated Heisenberg model on a layered triangular lattice // Low Temperature Physics. 2006. Vol. 32, N 3. P. 241–244.
 11. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A. Cluster algorithms of the Monte Carlo method, finite-size scaling, and critical exponents of complex lattice models // JETP. 2001. Vol. 93, N 6. P. 1330–1336.
 12. Kamilov I.K., Murtazaev A.K., Aliev Kh.K. Monte Carlo studies of phase transitions and critical phenomena // Physics-USpekhi. 1999. Vol. 42, N 7. P. 689–709.
 13. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Aliev K.K. Finite-size scaling and critical exponents of the real antiferromagnetic model // JMMM. 1999. Vol. 204, N 1. P. 151–158.
 14. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Ramazanov M.K. Critical properties of the three-dimensional frustrated Ising model on a cubic lattice // [Physics of the Solid State](#). 2005. Vol. 47, N 6. P. 1163–1168.
 15. Kawamura H. Monte Carlo Study of Chiral Criticality – XY and Heisenberg Stacked-Triangular Antiferromagnets // J. Phys. Soc. Jap. 1992. Vol. 61, N 4. P. 1299–1325.
 16. Сосин С.С., Прозорова Л.А., Смирнов А.И. Новые магнитные состояния в кристаллах // УФН. 2005. Т. 175. С. 92–99.
 17. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование фазовых переходов фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами Монте-Карло // ФТТ. 2010. Т. 52, № 8. С. 1557–1562.
 18. Mailhot A., Plumer M.L., Caille A. Finite-size scaling of the frustrated model on a hexagonal lattice // Phys. Rev. B. 1994-II. Vol. 50, N 10. P. 6854–6858.
 19. Binder K., Wang J.S. Finite-size Effects at Critical Points with Anisotropic Correlations: Phenomenological Scaling Theory and Monte Carlo Simulations // J. Stat. Phys. 1989. Vol. 55. P. 87–126.
 20. Kawamura H. Monte Carlo Study of Chiral Criticality – XY and Heisenberg Stacked-Triangular Antiferromagnets // J. Phys. Soc. Jap. 1992. Vol. 61, N 4. P. 1299–1325.
 21. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Фазовые переходы и критические свойства фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями следующих за ближайшими соседями // ЖЭТФ. 2012. Т. 142, вып. 2. С. 338–344.
 22. Рамазанов М.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 335–338.

Поступила в редакцию 25.06.2013 г.
Принята к печати 18.12.2013 г.