

Компьютерное моделирование разбавленных магнитных наноструктур

А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,3}

¹ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, г. Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный педагогический университет, Россия

³Дагестанский государственный университет, Россия

E-mail: b_albert78@mail.ru

Статья поступила в редакцию 20 мая 2016 г., после переработки 21 июня 2016 г., опубликована онлайн 24 октября 2016 г.

Методом Монте-Карло исследуются модели наноструктур магнитных материалов, содержащих слабый замороженный беспорядок в виде немагнитных примесей. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 20-60$ при концентрациях спинов $p = 1,0; 0,90$. Построены температурные зависимости термодинамических параметров теплоемкости C , восприимчивости χ и кумулянтов Биндера четвертого порядка для частиц со свободными границами. Показано, что в исследованной модели малых магнитных частиц с примесями наблюдается фазовый переход второго рода.

Методом Монте-Карло досліджено моделі наноструктур магнітних матеріалів, які містять слабкі заморожені безладдя у вигляді немагнітних домішок. Розглянуто системи з лінійними розмірами $L = 20-60$ при концентраціях спінів $p = 1,0; 0,90$. Побудовано температурні залежності термодинамічних параметрів теплоємності C , сприйнятливості χ та кумулянтів Біндера четвертого порядку для частинок з вільними межами. Показано, що в дослідженій моделі малих магнітних частинок з домішками спостерігається фазовий перехід другого роду.

PACS: 75.40.Cx Статические свойства;
75.40.Mg Изучение на численных моделях.

Ключевые слова: магнитные наноструктуры, метод Монте-Карло, фазовый переход второго рода.

Бурное развитие современной техники привело к широкому внедрению в практику материалов с неизвестными ранее свойствами, характерный масштаб неоднородностей которых меняется от микронных до атомных размеров. Такие материалы в последнее время нашли широкое применение в технике. Изучение фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в таких наноматериалах, содержащих примеси и другие дефекты структуры, представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это обусловлено тем, что большинство реальных наноматериалов всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно изменять поведение систем при ФП. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные де-

фекты структуры влияют на поведение наносистем при ФП. Строгие аналитические расчеты магнитных и тепловых характеристик для таких систем сильно затруднены. Это связано с необходимостью правильного учета в теории сильных межспиновых взаимодействий и невозможностью использовать в расчетах переход к термодинамическому пределу. Лабораторные эксперименты также сталкиваются с большими трудностями и при их постановке, и при интерпретации результатов [2]. Практически все эти трудности могут быть преодолены при изучении малых слабо неупорядоченных систем методами Монте-Карло (МК) [3].

На основе эвристических аргументов было показано, что замороженные немагнитные примеси изменяют критические показатели системы, если соответствующий показатель теплоемкости чистой системы положительен (критерий Харриса) [4]. В то же время имеют-

ся основания предполагать, что немагнитные примеси оказывают совершенно иное влияние, вплоть до изменения рода ФП, если в чистом состоянии система испытывает ФП первого рода.

В настоящей работе исследованы ФП в наноструктурных магнитных материалах, описываемых трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной моделью Изинга на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло. При изучении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: 1) в узлах кубической решетки расположены спины S_i , принимающие значения $S_i = \pm 1$, и немагнитные примеси (вакансии). Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder); 2) энергия связи между двумя узлами равна нулю, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если оба узла заняты магнитными атомами.

С учетом этих особенностей гамильтониан такой наносистемы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j S_i S_j, \quad (1)$$

где

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин;} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь.} \end{cases}$$

Исследование фазовых переходов и критических свойств этой модели с периодическими граничными условиями (ПГУ) проведены нами в работе [5], в которой показан двухрежимный характер критического поведения.

В настоящей работе расчеты проводили для спиновых систем кубической формы $L \times L \times L = N$ со свободными границами и $L = 20-60$, где L — линейный размер решетки в единицах межатомных расстояний. Для перевода малых неупорядоченных магнитных систем в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех наносистем с линейными размерами L . Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$, а конфигурационное усреднение осуществляли по 1000 различным начальным конфигурациям. Одна из особенностей наночастиц состоит в том, что они имеют относительно большую долю поверхностных элементов, и многие их свойства в значительной мере обусловлены именно наличием поверхности.

Для наблюдения за температурным поведением теплоемкости и восприимчивости использовали флуктуационные соотношения [6]:

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

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (3)$$

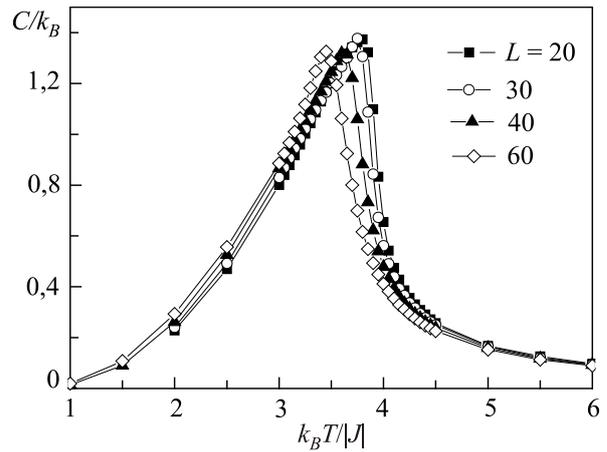


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B для трехмерной слабо разбавленной модели наноструктуры при $p = 0,9$.

где $K = |J|/k_B T$, $N = pL^3$, U — внутренняя энергия, m — намагниченность системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости слабо разбавленных систем (концентрация спинов $p = 0,90$) с линейными размерами $L = 20, 30, 40, 60$. Как видно на рис. 1 и 2, с увеличением числа частиц в системе максимум как теплоемкости C/k_B , так и восприимчивости χ в критической области растет и смещается в сторону более высоких температур, что является характерной чертой для систем со свободной границей.

Для всех рассмотренных нами малых магнитных систем, содержащих замороженный беспорядок в виде замороженных немагнитных примесей, нами рассчитаны температуры фазовых переходов как на основе максимумов теплоемкости и восприимчивости, так и с

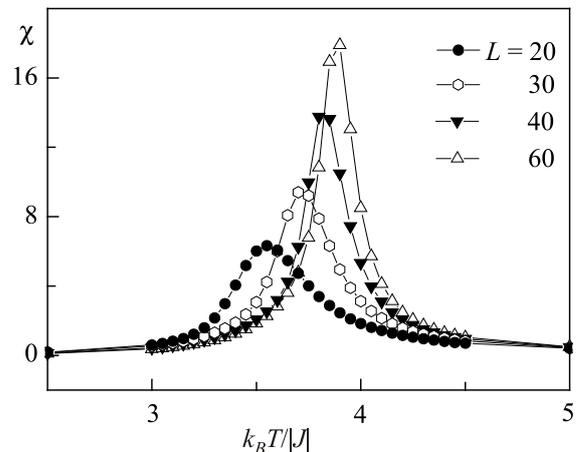


Рис. 2. Температурные зависимости восприимчивости χ для трехмерной слабо разбавленной модели наноструктуры при $p = 0,9$.

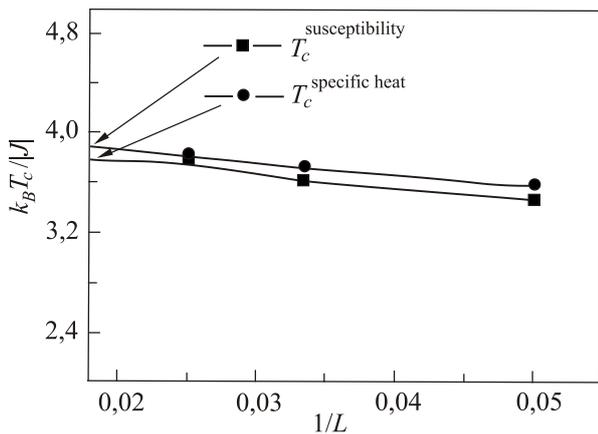


Рис. 3. Зависимость критической температуры от линейных размеров наноструктуры при $p = 0,9$.

применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка [7]. Методика определения критических температур с использованием метода кумулянтов Биндера подробно рассмотрена в работах [8–11]. Зависимости критических температур $T_c^{\text{susceptibility}}$ и $T_c^{\text{specific heat}}$ ФП, определенные из температурных зависимостей восприимчивости χ и теплоемкости C/k_B соответственно от линейных размеров системы L , представлены на рис. 3. Как видно на рис. 3 предельные значения критических температур ФП при $L \rightarrow \infty$ не совпадают.

Таким образом, результаты, представленные в настоящей работе, свидетельствуют, что в слабо разбавленной модели Изинга на простой кубической решетке со свободными граничными условиями наблюдается фазовый переход второго рода. Показано, что критические температуры, определенные по максимумам теплоемкости и восприимчивости, не совпадают для слабо разбавленных наноструктур. Установлено, что предельное значение T_c при $L \rightarrow \infty$, полученное по данным о восприимчивости в пределах погрешности, совпадает со значением T_c для слабо разбавленных магнитных систем с ПГУ, рассчитанным в работе [5]. Полученные температурные зависимости для термодинамических систем демонстрируют степень влияния доли поверхностных спинов на термодинамические свойства слабо разбавленных наноструктур. В других моделях для простой кубической решетки, скажем, в моделях Поттса с ПГУ и числом состояний спина $q = 3$ и $q = 4$, примеси могут оказать совершенно иное влияние вплоть до изменения рода ФП (см. [12–14]).

Работа поддержана грантами РФФИ №16-02-00214.

1. А.И. Гусев, *Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии*, Физматлит, Москва (2005).
2. Ю.И. Петров, *Физика малых частиц*, Наука, Москва (1982).
3. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
4. A.V. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
5. A.K. Murtazaev, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **126**, 1377 (2004) [*JETP* **99**, 1201 (2004)].
6. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys.Rev. B* **43**, 6087 (1991).
7. D.P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
8. A.K. Murtazaev and A.B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2630 (2009).
9. A.K. Murtazaev, А.Б. Бабаев, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 618 (2014) [*JETP Lett.* **99**, 535 (2014)].
10. A.K. Murtazaev, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 267 (2014) [*JETP Lett.* **100**, 242 (2014)].
11. A.K. Murtazaev and A.B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012).
12. A.K. Murtazaev, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФНТ* **37**, 167 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 134 (2011)].
13. A.K. Murtazaev, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ЖЭТФ* **136**, 516 (2009) [*JETP* **109**, 442 (2009)].
14. А.Б. Бабаев, А.К.Муртазаев, *ФНТ* **41**, 784 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 608 (2015)].

Computer simulation of the weakly diluted magnetic nanostructures

A.B. Babaev and A.K. Murtazaev

In the given work as a method of Monte Carlo are investigated nanostructures of magnetic materials containing weak quenched disorder in the form of nonmagnetic impurities. Considered systems with linear sizes $L = 20-60$ spins at concentrations $p = 1.0, 0.90$. The dependences of the thermodynamic parameters of specific heat C , the susceptibility χ and cumulants Binder fourth order of temperature for particles with the free boundaries. It is shown that in the studied weakly diluted model of small magnetic particles is observed the phase transition of the second order.

PACS: 75.40.Cx Static properties;
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: magnetic nanostructures, method of Monte Carlo, the phase transition of the second order.