Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»
Кафедра теоретической физики

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 2

ТВЕРЬ 2010

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
Ф50

Рецензенты:
Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, проректор по научной работе Тверского государственного технического университета
В.А. Тихомиров
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо- и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета
Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:
Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);
Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;
Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;
Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора, ответственный секретарь);
Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;
Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;
Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2010. – Вып. 2. – 168 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области физики межфазных явлений и нанонауки, включая нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-0560-4

© Коллектив авторов, 2010
© Тверской государственный университет, 2010

УДК 537.612.4:620.22+539.216.2+537.621

ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗИНГОВСКОГО НАНОМАГНЕТИКА НА ПОРОГ ОДНОМЕРНОГО ПРОТЕКАНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Е.П. Лаюров, В.Н. Удодов
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова
655017 г. Абакан ул. Ленина 90
evgeniy2007-85@mail.ru

Изучено влияние энергии взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах на порог протекания магнетика нанометровых размеров в рамках модифицированной модели Изинга при наличии постоянного внешнего магнитного поля.

Введение

Исследование магнетизма является одной из важнейших задач современной физики конденсированного состояния [1]. В последние десятилетия большое внимание специалистов занимающихся исследованием и созданием новых материалов вызвали наноструктурные материалы [2]. Значительные усилия были направлены на изучение примесных и дефектных структур и при этом были синтезированы вещества, которые можно рассматривать как аналоги низкомерных магнитных систем [2, 3]. Моделирование таких систем может позволить продвинуться в создании теории конструирования принципиально новых наноструктурных материалов [4]. В этом отношении моделирование магнитных фазовых переходов представляют собой обширную и еще не завершенную область исследований, где в последние десятилетия активно выясняется природа переходов в магнитоупорядоченное состояние в самых разнообразных кристаллических телах [5]. Наибольший интерес представляет рассмотрение так называемых «смешанных» физических систем, в которых одновременно наблюдается сразу несколько явлений. С технической точки зрения большое значение представляет рассмотрение хорошо известного явления протекания применительно к магнитным системам.

Таким образом, целью работы является исследование методом компьютерного моделирования зависимости порога протекания от энергии взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах в псевдоодномерном магнетике при наличии внешнего магнитного поля. Для решения поставленной задачи использовалась модифицированная

модель Изинга, гамильтониан которой с учётом взаимодействия до четвёртой координационной сферы включительно имеет следующий вид:

$$\frac{\mathrm{E}_0}{\omega_1} = -h\sum_{i=1}^{N} S_i - \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} - J_4 \sum_{i=1}^{N-4} S_i S_{i+4} \,, \quad (1)$$

где S_i – безразмерная проекция вектора спина на некую выделенную ось. Если $S_i = 1$ спин направлен вверх, если $S_i = -1$ спин направлен вниз, h – безразмерная напряженность магнитного поля (проекция на ту же ось), E_0 – энергия кристалла, ω_1 – энергия взаимодействия в первой координационной сфере , $J_2 = \omega_2 / \omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия во второй координационной сфере, $J_3 = \omega_3 / \omega_1$ и $J_4 = \omega_4 / \omega_1$ – относительный энергетический параметр взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах соответственно.

Температура системы θ измеряется в безразмерных единицах:

$$\theta = kT \Big/ \omega_1 \,, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана; ω_1 – энергия взаимодействия в первой координационной сфере; T – абсолютная температура. При перколяционном подходе [6] $S_i = -1$ считается блокированным узлом, а $S_i = +1$ – целым.

Зависимость порога протекания от взаимодействия во второй координационной сфере

В ходе компьютерного эксперимента были построены графики зависимости порога протекания P_c от относительного энергетического параметра взаимодействия во второй координационной сфере j_2 для случая малой наномагнитной структуры при радиусе протекания $R = 3$ (третья координационная сфера включительно), температуре $\Theta = 0{,}1$ и постоянном магнитном поле без учета взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах. Из полученных графиков видно (рис.1), что с увеличением величины взаимодействия во второй координационной сфере (параметр j_2) порог протекания увеличивается от 0,5 и стремится к 1 при положительном значении j_2.

Данное поведение можно объяснить с помощью диаграмм основных состояний. На соответствующей диаграмме (рис.2) область *a* представляет собой ферримагнетик, а *Ф*1 – ферромагнетик. Если увеличивать взаимодействие во второй координационной сфере j_2 ,то порог

протекания в магнитной фазе из ферримагнетика в ферромагнетик испытывает скачок.

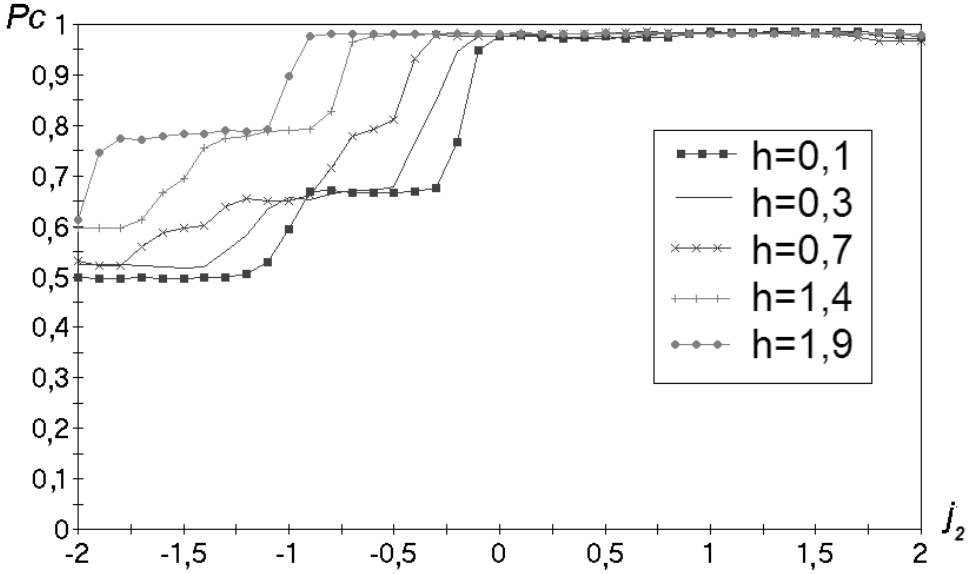

Рис.1 Зависимость порога протекания P_c от взаимодействия во второй координационной сфере j_2, $R = 3$, $\Theta = 0{,}1$.

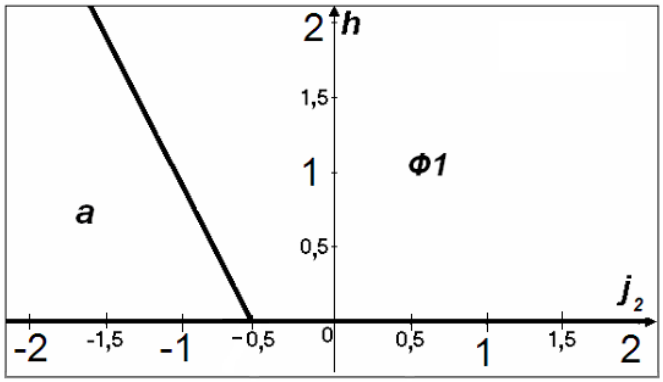

Рис.2 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика.

При этих же параметрах, была исследована зависимость порога протекания P_c от j_2 при разной начальной температуре Θ и фиксированном значении внешнего магнитного поля. Данная зависимость представлена на рис. 3. Из анализа полученных данных можно сделать вывод, что с увеличением температуры Θ графики становятся более плавными. Стоит отметить, что при разной температуре все графики проходят через одну точку в области $-0{,}5 < j_2 < -1{,}5$. Это можно объяснить тем, что именно в этой области находится граница между фазами *a* и *Ф*1 (рис. 2).

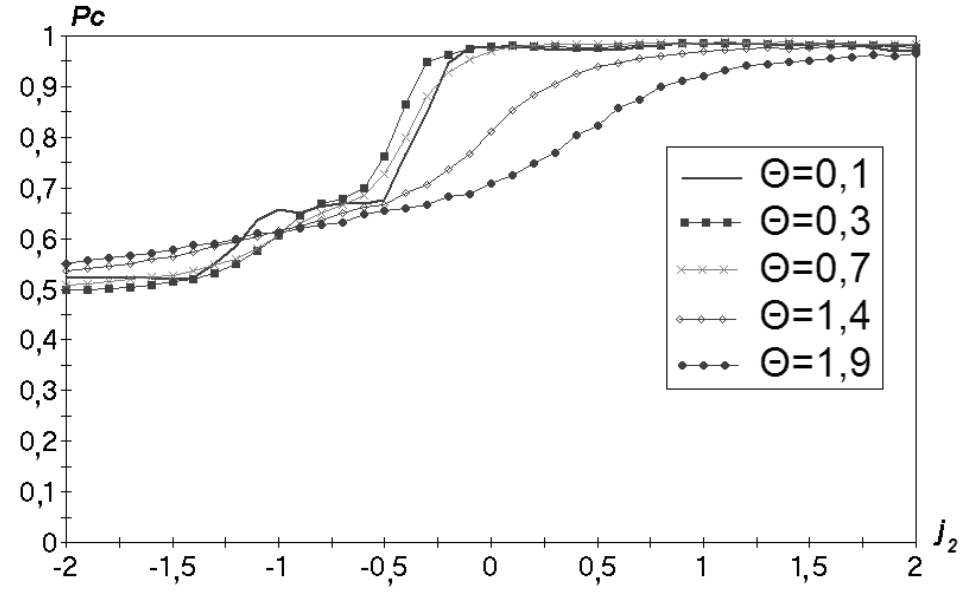

Рис.3 Зависимость порога протекания P_c от взаимодействия во второй координационной сфере j_2, $R = 3$, $h = 0,3$.

Зависимость порога протекания от взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах

При исследовании зависимости порога протекания P_c от взаимодействия в третьей j_3 и четвёртой j_4 координационных сферах (рис. 4 и 5) соответствующие им диаграммы основных состояний обладали большим количеством различных магнитных фаз. Так на диаграммах присутствуют ферромагнетик, ферримагнетик и некоторые другие промежуточные магнитные фазы (рис. 6 и 7).

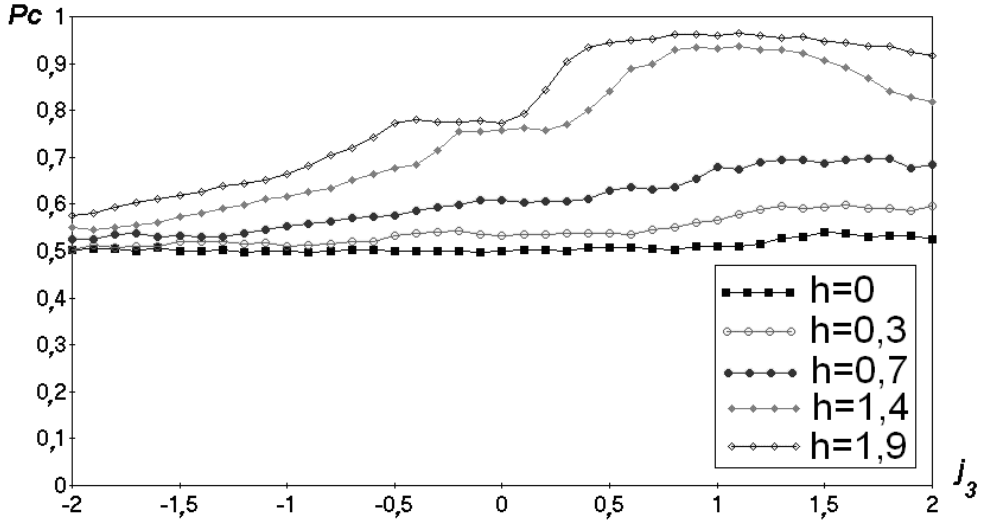

Рис.4 Зависимость порога протекания P_c от j_3, $R = 3$, $j_2 = -1,3$, $\Theta = 0,3$, $h > 0$.

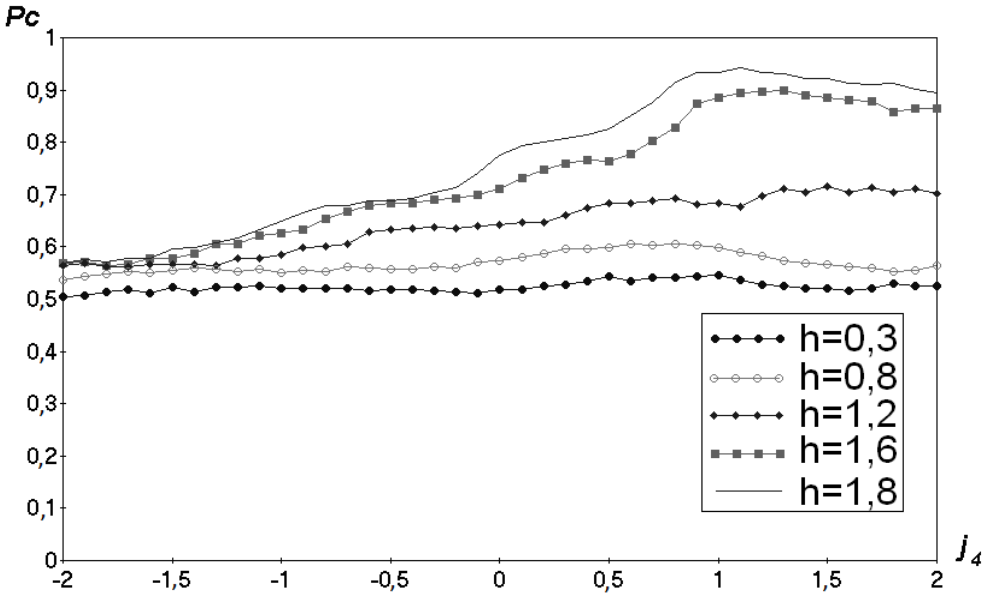

Рис.5 Зависимость порога протекания P_c от j_4, $R=3$, $j_2=-0,7$, $j_3=-1,0$, $\Theta=0,3$, $h>0$.

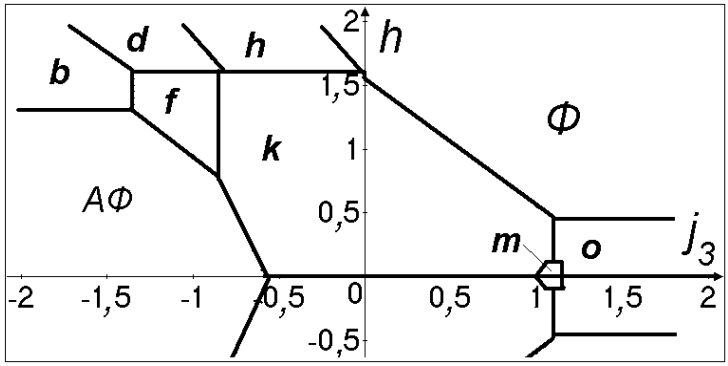

Рис.6 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика, при $j_2=-1,3$.
Φ: 1111111111; *AΦ*: 11-1-1-1111-1-1; *b*: 111-1-1-1111-1; *d*: 1111-1-1-1111; *f*: 111-1-1111-1-1; *h*: 11111-1-1111; *k*: 11-1-111-1-111; *m*: 11-1-111-1-111; *o*: -111-111-111-1.

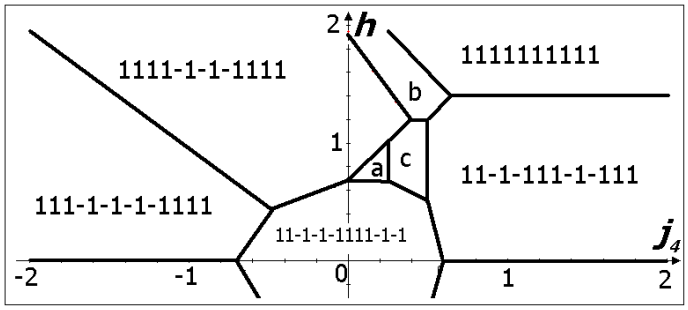

Рис.7 Диаграмма основных состояний псевдоодномерного магнетика,
$j_2=-0,7$, $j_3=-1,0$. *a*: 111-1-1-1111-1; *b:* 11111-1-1111; *c:* 111-1-1111-1-1.

Из-за того, что на диаграмме основных состояний присутствует много промежуточных магнитных фаз, характер изменения порога протекания различный. Если увеличивать взаимодействие в третьей и четвёртой координационных сферах, то при отсутствии внешнего магнитного поля ($h = 0$) график представляет почти прямую линию, то есть дальнее взаимодействие практически не влияет на порог протекания. При значительном магнитном поле ($h \approx 1{,}9$) порог протекания возрастает в зависимости от тех фаз на диаграмме, в которые попадает при увеличении j_3 или j_4, то есть взаимодействие в третьей и четвёртой координационных сферах сильно влияет на порог протекания (рис. 6 и 7).

Проведённые дальнейшие исследования показали схожесть зависимостей порога протекания от взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах. Различие заключается в разных областях стабильности тех или иных магнитных фаз, что дает разный характер возрастания порога протекания. Данный вывод хорошо виден из анализа рисунков 4 и 5.

Заключение

Таким образом, взаимодействие во второй, третьей и четвёртой координационных сферах и величина магнитного поля существенно влияют на порог одномерного протекания. Показано, что при увеличении температуры графики зависимости порога протекания магнитной системы от параметров взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах становятся более плавными. Температура сглаживает графики не зависимо от радиуса протекания и размеров моделируемой системы.

Увеличение внешнего магнитного поля приводит к изменению характера зависимости порога протекания от параметра взаимодействия во второй, третьей и четвёртой координационных сферах. Порог протекания возрастает при значительном увеличении магнитного поля, а при его отсутствии практически не изменяется. В отличие от взаимодействия во второй координационной сфере, диаграммы основных состояний с учётом взаимодействия в третьей и четвёртой координационных сферах имеют больше различных магнитных фаз.

По диаграммам основных состояний можно судить о магнитных фазах в том или ином состоянии, что позволяет проследить изменение порога протекания с учётом влияния внешнего магнитного поля и температуры.

Библиографический список

1. *Носкова, Н.И.* Субмикрокристаллические и нанокристаллические металлы и сплавы / Н.И. Носкова, Р.Р. Мулюков. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 279 с.
2. *Удодов, В.Н.* Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н. Удодов, А.И. Потекаев, А.А. Попов и др. – Абакан: Издательство ХГУ им. Н. Ф. Катанова, 2008. – 158 с.
3. *Ландау, Л.Д.* Статистическая физика. Часть 1. / Л.Д. Ландау , Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
4. *Камилов, И.К.* Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте – Карло / И.К. Камилов , А.К. Муртазаев , Х.К. Алиев // УФН. – 1999. – Т. 169. – №7. – С. 773-795.
5. *Санников, Е.В.,* Фазовые переходы в одномерных магнетиках / Е.В. Санников , Р.А. Козлитин,, В.Н.Удодов , А.И. Потекаев // Известия ВУЗов. Серия «Физика». – 2006. – № 3. – С. 54–58.
6. *Эфрос, А.Л.* Физика и геометрия беспорядка / А. Л. Эфрос. – М.: Наука, 1982. – 270 с.