

*Е. В. Шабунина, Д. В. Спирин, В. Н. Удодов*

### **Особенности поведения теплоемкости в одномерных магнетиках, описываемых моделью Изинга**

*E. V. Shabunina, D. V. Spirin, V. N. Udodov*

### **Features of the Behavior of the Specific Heat in One-dimensional Magnets Described by the Ising Model**

Для модели одномерного изинговского магнетика методом Монте-Карло исследованы температурные зависимости теплоемкости и критического индекса теплоемкости при учете взаимодействия во второй и третьей координационных сферах. Доказана универсальность индекса  $\alpha$  для различных размеров цепочек. Установлено, что критический индекс существенно зависит от энергии взаимодействия во второй и третьей координационных сферах: в этом смысле универсальности нет.

**Ключевые слова:** наномагнетик, ферромагнетики, одномерная модель Изинга, теплоемкость, критические индексы.

**Введение.** Одно из основных направлений исследований в физике низких температур — это изучение кооперативных явлений в конденсированных средах [1, 2]. Эти явления (магнетизм, сверхпроводимость, сверхтекучесть) имеют место благодаря взаимно согласованному поведению частиц. Данная работа посвящена изучению явлений, связанных с проявлением низкоразмерного магнетизма [3, 4]. Помимо трехмерных объектов интерес представляют магнитные системы пониженной размерности. К ним относятся магнитные наноточки (0D системы), магнитные цепочки (1D системы) и пленки (2D системы). Так, проволоочные (или нитевые) структуры можно считать одномерными (1D). Такие структуры получают либо электрохимическим осаждением, в том числе через треки травления в полимерных мембранах, осаждением на ступенчатую поверхность, с помощью литографических методов либо резким охлаждением расплава во вращающейся жидкости. Массивы нанонитей являются перспективной средой для будущих технологий магнитной записи с перпендикулярной намагниченностью. Другой областью применений являются сенсоры [4].

Также есть ряд магнитных материалов, которые ввиду особенностей строения можно свести к одномерной модели (квазиодномерные материалы). Например, трехмерные кристаллы, в которых магнитные атомы могут оказаться изолированными (т. е. взаимодействие между соседними атомами имеет очень низкую энергию) по всем или по некоторым направлениям в кристалле и в результате образуются (почти)

The temperature dependences of a specific heat and a critical exponent  $\alpha$  of a specific heat is investigated by means of Monte Carlo simulations for Ising model magnetic, taking into account the interactions in the second and third coordination spheres. Universality of index  $\alpha$  for the various sizes of chains is proved. It is established that the critical exponent  $\alpha$  significantly depends on energy of interaction in the second and third coordination spheres.

**Key words:** nanomagnets, ferromagnets, one-dimensional Ising model, specific heat, critical indices.

независимые одномерные цепочки (строго говоря, конечной длины). Известно, что в соединении  $\text{CsCuCl}_3$  ионы Cs и Cl формируют гексагональную плотноупакованную решетку, а ионы  $\text{Cu}^{2+}$  образуют магнитные цепочки вдоль оси z. Особенность этих соединений состоит в том, что обменное взаимодействие вдоль оси цепочки ионов  $\text{Cu}^{2+}$  намного больше, чем в базисной плоскости [5]. Среди подобных соединений встречаются вещества с типом взаимодействия, описываемым моделью Изинга (например,  $\text{RbCoCl}_3$ ,  $\text{CsCoCl}_3$ ,  $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$  и др.). Обменное взаимодействие таких веществ обладает предельной анизотропией: во взаимодействии участвуют только z-компоненты электронных магнитных моментов соседних атомов. Далее будем рассчитывать физические характеристики исходя из модели Изинга [6].

В низкоразмерных системах фазовые переходы имеют ряд особенностей. К сожалению, до сих пор нет исчерпывающей теории, которая бы описывала явления в критической области. В настоящее время экспериментаторы интенсивно изучают аномальное поведение некоторых физических величин в критической области, а в теории для их анализа используют феноменологические и микроскопические подходы [5–11]. Во многих случаях различные физические величины ( $M$ ) в критической области имеют вид простой степенной зависимости от некоторого параметра  $\varepsilon$ :  $M(\varepsilon) \approx A\varepsilon^\beta$ , где  $\beta$  — так называемый критический показатель или критический индекс. Данные индексы измеряются экспериментально (для трехмерных

и двумерных систем). Доказано, что индексы существенно зависят от размерности пространства и распространять полученные данные на материалы, описываемые одномерными моделями, нельзя [7–11].

Детальная информация о структуре и кинетических свойствах квазиодномерных наномангнетиков может быть получена при развитии методов компьютерного моделирования указанных систем с учетом имеющихся экспериментальных данных [7]. Большой интерес к компьютерному моделированию в области физики связан как с быстрым ростом производительности вычислительных машин, так и разработкой новых алгоритмов и методов исследования, позволяющих оптимизировать процесс вычислений, сократив тем самым общие вычислительные затраты.

В работе исследована теплоемкость одномерно изинговского магнетика при равновесном фазовом переходе из антиферромагнитного состояния в ферромагнитное состояние. Рассмотрены влияния температуры, взаимодействия до третьей координационной сферы и размеров цепочек, рассчитан критический индекс теплоемкости.

**Описание модели.** Для описания системы примем ограничение радиуса действия потенциала взаимодействия до третьих соседей. Благодаря этому вместо «реального» межатомного потенциала, задаваемого некоторой функцией  $v(r)$  с бесконечным числом возможных значений, появляется конечный набор значений этой функции в точках, определяемых возможными расстояниями между узлами решетки в пределах радиуса действия потенциала [8].

В данной работе используется модифицированная модель Изинга (в традиционной модели учтены только взаимодействия ближайших соседей). Узлы одномерного изинговского магнетика, выстроенные вдоль одной прямой (цепочкой), имеют равные по модулю магнитные моменты, ориентированные или вдоль некоторой оси, или в обратном направлении. Граничные условия задаются как «оборванные концы» [6, 9], что соответствует отдельному магнитному кластеру. Для уменьшения числа изменяемых энергетических параметров рассматривается гамильтониан, приведенный к энергии взаимодействия в первой координационной сфере [6]

$$\frac{H}{J_1} = -\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

где  $J_1$  — энергия взаимодействия спинов в первой координационной сфере;  $J_2, J_3$  — относительная (безразмерная) энергия обменного взаимодействия во второй и третьей координационных сферах соответственно;  $h$  — относительная напряженность внешнего магнитного поля;  $S_i$  — проекция вектора спина на выбранную ось;  $N$  — количество атомов в системе;  $i$  — номер узла.

При исследовании модели использовались методы численного моделирования, в основе которых лежит

классический алгоритм Метрополиса с модифицированным выражением для энергии (1). Теплоемкость рассчитывалась после установления в системе равновесия, на шаге  $\tau + 3\sigma$ , где  $\tau$  — время релаксации системы — определяется как число шагов Монте-Карло, за которое она из начального состояния достигает равновесия, когда средние характеристики перестают меняться, а  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение времени релаксации в серии параллельных опытов. В отличие от [9], рассматривается фазовый переход из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние. Диапазон параметров для исследования подбирается исходя из диаграмм основных состояний [7].

**Теплоемкость и ее критический индекс.** Одними из важных термодинамических характеристик тела являются теплоемкость и критический индекс теплоемкости, измеряемый экспериментально (для двумерных и трехмерных систем). Воспользуемся методом расчета теплоемкости  $C$  при постоянном магнитном поле [10]. Данный метод измерения основан на связи  $C$  со статистическими флуктуациями полной энергии в каноническом ансамбле [11]

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta}. \quad (2)$$

В дальнейших расчетах использовалась формула, приведенная к виду [10]

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}, \quad (3)$$

где  $T$  — это относительная температура (единицы измерения  $J_1 / k_B$ ), а постоянная Больцмана принята за единицу. Формула справедлива для равновесных процессов (система в контакте с термостатом [10, 11]).

Температурная зависимость теплоемкости во флуктуационной области имеет вид [11] (строго говоря, это часть, связанная с фазовым переходом):

$$C \propto |t|^{-\alpha}, \quad (4)$$

где  $\alpha$  — критический индекс теплоемкости.

На основании полученных значений теплоемкости для двух близких температур был рассчитан критический индекс теплоемкости  $\alpha$ .

Зависимость теплоемкости от размеров системы является монотонно возрастающей для всех исследуемых температур. Температура выбирается на основе анализа зависимости корреляционной длины от температуры, таким образом, чтобы система находилась в критической области (размеры системы мало отличаются от корреляционной длины). Граница критической области определяется из соображений максимума производной корреляционной длины по температуре. Если рассмотреть значения теплоемкости на узел системы, то видно, что с ростом размеров системы зависимость от  $N$  ослабевает (рис. 1а). Рассмотрим,

как влияет размер системы на критический индекс  $\alpha$ . На рисунке 1б представлены зависимости критического индекса теплоемкости от размеров одномерной системы для различных температур. Индекс  $\alpha$ , в пре-

делах погрешности расчета, можно считать постоянным для определенной температуры (т. е.  $\alpha$  не зависит от длины цепочки). Значения  $\alpha$  отрицательны и существенно ниже, полученных для макротел [11].

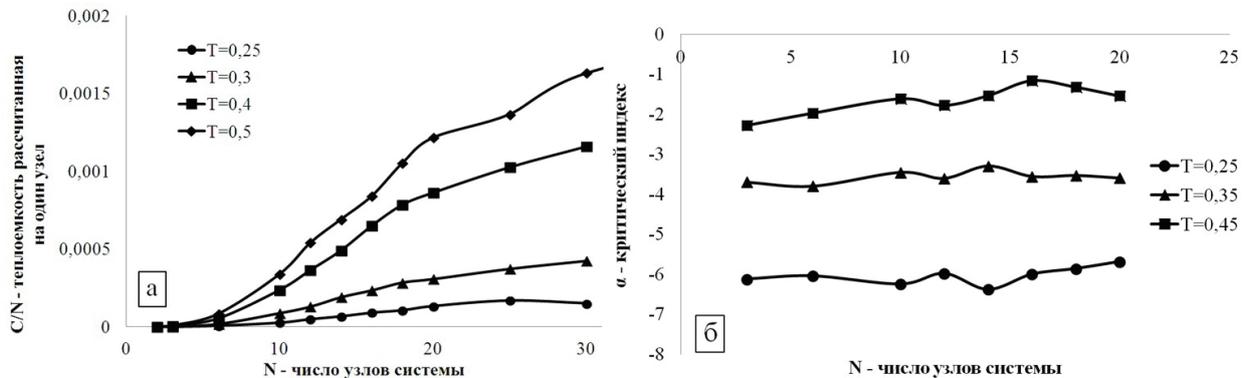


Рис. 1. а — зависимость теплоемкости  $C/N$ , рассчитанной на один узел, от размеров системы; б — зависимость критического индекса теплоемкости  $\alpha$  от размеров системы ( $H = J_2 = 0$ )

Влияние взаимодействия во второй координационной сфере проявляется следующим образом: рост энергии взаимодействия во второй координационной сфере приводит к постепенному уменьшению теплоемкости. При низкой температуре это влияние наиболее сильное. Если мы построим график зависимости натурального логарифма теплоемкости от  $J_2$ , то увидим что, с ростом температуры эта зависимость приближается к линейной (рис. 2а). Таким образом, можно сделать вывод, что при увеличении энергии

взаимодействия во второй координационной сфере теплоемкость квазиодномерного магнетика убывает по экспоненциальному закону (в пределах погрешности расчета).

В графиках, отражающих зависимость критического индекса теплоемкости от энергии взаимодействия во второй координационной сфере, наблюдается постепенное уменьшение значений индекса при росте  $J_2$ , на малых температурах появляются отклонения случайного характера (рис. 2б).

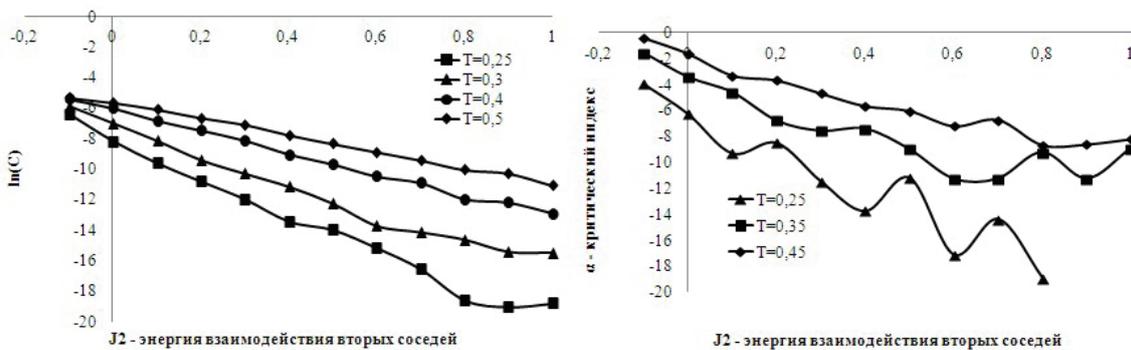


Рис. 2. а — зависимость натурального логарифма теплоемкости от энергии взаимодействия во второй координационной сфере; б — зависимость критического индекса теплоемкости  $\alpha$  от энергии взаимодействия во второй координационной сфере ( $N = 10; H = 0$ ).

Температурная зависимость теплоемкости имеет характерный для одномерных систем максимум (рис. 3а) [5]. При увеличении размеров системы он становится более выраженным и узким, однако его расположение по шкале температур сохраняется. Увеличение радиуса взаимодействия приводит к смещению максимума в область более высоких температур, делая его более пологим.

Критический индекс теплоемкости обладает сильной зависимостью от температуры, резко увеличива-

ясь с ее ростом (рис. 3б). Строго говоря, критический индекс вычисляется в пределе температуры, стремящейся к критической (равна нулю для одномерной модели Изинга), т. е. необходимо учитывать расчетные точки при самой низкой температуре. Остальные точки имеют вспомогательный характер. Учет взаимодействий во второй и третьей координационных сферах ослабляет зависимость  $\alpha$  от  $T$ , причем взаимодействие третьих соседей более существенно.

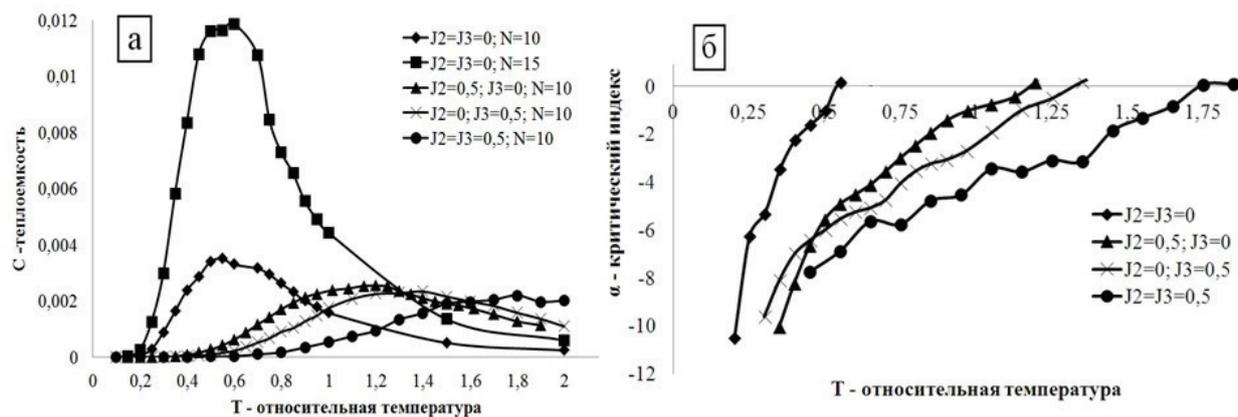


Рис. 3. а — зависимость теплоемкости от температуры; б — зависимость критического индекса теплоемкости  $\alpha$  от температуры ( $H = 0$ )

Таким образом, поведение теплоемкости низкоразмерных малых систем значительно отличается от подобных зависимостей для макротел: теряется универсальность критического индекса теплоемкости  $\alpha$ . Доказано, что индекс  $\alpha$  существенно зависит от характера взаимодействия. Температурная кривая  $C(T)$  имеет максимум, положение которого зависит от энергий взаимодействия вторых и третьих соседей. Критический индекс теплоемкости увеличивается с ростом температуры (при этом учет дальнего взаимодействия ослабляет эту зависимость), от размера системы он зависит слабо, в этом смысле универсальность сохраняется. Увеличение энергии взаимодействия вторых и третьих соседей приводит к уменьшению значений критического индекса теплоемкости  $\alpha$  до  $-19$ , что необычно и пока не наблюдалось экспериментально. Однако, исходя из анализа точного решения одномерной модели Изинга [12], можно заключить, что критический индекс теплоемкости может быть сколь угодно мал (и отрицателен).

**Заключение.** Сравним полученные нами значения индекса теплоемкости  $\alpha$  для одномерной модели Изинга со значениями для двумерного и трех-

мерного случаев. В теории фазовых переходов Ландау (и для двумерной модели Изинга в точном решении [11]) индекс  $\alpha = 0$ , а в трехмерной модели Изинга ( $D = 3$ )  $\alpha = 0,125 \pm 0,015$  [11]. Уже отсюда видно, что существует зависимость от размерности пространства. Если же провести оценку по методу Вильсона для различного числа  $n$  компонент параметра порядка, то получаются (для трехмерной системы) следующие значения критического индекса:  $\alpha = -0,07$  ( $n = 2$ ),  $\alpha = -0,115$  ( $n = 3$ ) [11]. Следовательно, значения критического индекса теплоемкости  $\alpha$  для одномерной модели Изинга существенно отличаются от таковых для двумерных и трехмерных магнетиков. То, что индекс  $\alpha$  отрицателен, означает, что скачок теплоемкости при фазовом переходе равен нулю. Отрицательный и большой по модулю индекс  $\alpha$  свидетельствует об аномально сильной зависимости теплоемкости от температуры для одномерных магнетиков при температуре, стремящейся к нулю. Это может быть интересно для практических приложений. Для проверки полученных результатов необходимы дальнейшие теоретические и особенно экспериментальные исследования.

## Библиографический список

1. Камилов И. К. Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах (цикл работ). — Махачкала, 2011.
2. Актуальные проблемы физики конденсированных сред. — Казань, 2004.
3. Спирин Д. В., Удодов В. Н. и др. Исследование маломерного одномерного магнетика методом Монте-Карло // Моделирование неравновесных систем — 2002: мат. V Всерос. семинара. — Красноярск, 2002.
4. Лекции Н. Г. Чеченина «Физика магнитных наноструктур» [Электронный ресурс]. — URL: <http://danp.sinp.msu.ru/MagNano/L12.pdf>
5. Александров К. С., Федосеева Н. В., Спешакова И. П. Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах. — Новосибирск, 1983.
6. Удодов В. Н., Потекаев А. И., Попов А. А. и др. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах. — Абакан, 2008.

7. Спирин Д. В. Особенности критической динамики изинговских наноразмерных магнетиков: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Томск, 2008.
8. Захаров А. Ю. Решеточные модели статистической физики: учеб.-метод. пособие. — Великий Новгород, 2006.
9. Спирин Д. В., Удодов В. Н., Потекаев А. И., Голосов Н. С. Кинетические свойства малого одномерного изинговского магнетика // Известия вузов. Физика. — 2005. — Т. 48, № 4.
10. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. — М., 1990. — Ч. 2.
11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: в 10 т. Т. V: Статистическая физика. — М., 2005. — Ч. I.
12. Удодов В. Н. Характер фазового перехода в одномерной традиционной модели Изинга и переходы дробного рода // Моделирование неравновесных систем — 2009: мат. XII Всерос. семинара. — Красноярск, 2009.