

УПОРЯДОЧЕНИЕ И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В 1D И 2D СИСТЕМАХ КОНЕЧНОГО ЧИСЛА СПИНОВ ИЗИНГА. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТОЧНЫЙ РАССЧЕТ

В.И. Белокоп, К.В. Нефедев

Дальневосточный государственный университет, Владивосток;
Институт физики и информационных технологий, Владивосток, (belokon@ifit.phys.dvgu.ru)

Эффекты магнитного последействия в горных породах принято объяснять как необратимыми переворотами магнитных моментов отдельных ферромагнитных зерен в результате термических флуктуаций, так и стабилизацией доменных границ в результате диффузии в них дефектов кристаллической решетки. Что касается однодоменных зерен, с которыми связывается наиболее стабильная часть остаточной намагниченности, при объемах порядка 10^{-17} см³ (количество атомов $10^6 - 10^7$) они близки к суперпарамагнитным и могут заметно терять намагниченность во времени [1]. Кроме того, группы магнитных атомов, не вошедших в компактное образование типа зерна, могут иметь фрактальную структуру с переменным числом ближайших соседей. В этой связи представляет интерес исследовать процессы упорядочения в системах конечного числа частиц в одномерной (1D) и двумерной (2D) модели Изинга.

Магнитное упорядочение может быть описано с помощью параметров порядка, являющихся средними по всему ансамблю состояний системы спинов, поэтому для точного расчета свойств и зависимости от температуры усредненных магнитных характеристик требуется иметь информацию о статистическом весе каждой конфигурации спинов, т.е. требуется знание статистической суммы. Задача об одномерной цепочке спинов Изинга допускает существование точного решения [2], т.е. известна производящая функция, позволяющая построить полную статистическую сумму для любого числа частиц. До сегодняшнего дня остается открытым вопрос о существовании точного решения, для намагниченности во внешнем поле двумерной решетки спинов Изинга.

В данной работе рассматривается процесс магнитного упорядочения в замкнутой цепочке спинов Изинга, а также в системе конечного числа спинов на плоской решетке. Полученные теоретические результаты для двумерной решетки сравнивались с результатами численных экспериментов методом Монте-Карло, с использованием алгоритмов Метрополиса и «термостата» [3]. Компьютерное моделирование плоской модели Изинга позволяет вычислить точку бифуркации и получить зависимость среднеквадратичной намагниченности от температуры, для которых данная зависимость не может быть получена точно. Как будет показано, среднеквадратичная намагниченность конечных 1D и 2D систем спинов Изинга отлична от нуля при отсутствии средней намагниченности.

1D модель В одномерной решеточной модели Изинга имеется N штук магнитных моментов (спинов), расположенных в узлах замкнутой цепочки, $S_N = S_1$. Стандартный гамильтониан учитывает обменное спин-спиновое взаимодействие J спина S_i со своими соседями и его энергию во внешнем магнитном поле h

$$H = - \sum_i^N JS_i S_{i+1} - h \sum_i^N S_i. \quad (1)$$

В этом случае статистическая сумма N спинов есть

$$Z_N(B, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \text{Exp} \left[\sum_i (KS_i S_{i+1} + BS_i) \right], \quad (2)$$

где переменные $S_1 \dots S_N$ принимают значения ± 1 , $K = \beta J$, $B = \beta h$ и $\beta = 1/T$. Для $D=1$

$$Z_N(B, T) = \text{Trace} \left[\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N \right] = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (3)$$

$$\lambda_{\pm} = e^K \cosh B \pm (e^{2K} \sinh^2 B + e^{-2K})^{1/2}. \quad (4)$$

Естественно, что средняя намагниченность на один спин при $B=0$

$$M(T) = \frac{1}{N} \frac{T}{Z_N} \left(\frac{\partial Z_N}{\partial B} \right)_{B \rightarrow 0} = \frac{1}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \left(\lambda_+^{N-1} \frac{\partial \lambda_+}{\partial B} + \lambda_-^{N-1} \frac{\partial \lambda_-}{\partial B} \right) = 0 \quad (5)$$

Этот результат находится в согласии с симметричной структурой статистической суммы, где каждая энергия дважды вырождена по спиновому избытку (одному и тому же значению энергии соответствуют разные проекции вектора $\mathbf{M}$ на выделенное направление H).

Среднеквадратичное значение намагниченности в отсутствие внешнего поля для любого конечного числа частиц отлично от нуля (!)

$$M^2(T) = \frac{1}{N^2} \frac{T^2}{Z_N} \left(\frac{\partial^2 Z_N}{\partial B^2} \right)_{B \rightarrow 0} \neq 0, \quad (6)$$

так как

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^2} \frac{T^2}{Z_N} \left(\frac{\partial^2 Z_N}{\partial B^2} \right) &= \frac{1}{NZ_N} \left((N-1) \lambda_+^{N-2} \left(\frac{\partial \lambda_+}{\partial B} \right)^2 + (N-1) \lambda_-^{N-2} \left(\frac{\partial \lambda_-}{\partial B} \right)^2 + \lambda_+^{N-1} \frac{\partial^2 \lambda_+}{\partial B^2} + \lambda_-^{N-1} \frac{\partial^2 \lambda_-}{\partial B^2} \right) = \\ &= \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \frac{e^{2K}}{N}. \end{aligned}$$

После элементарных математических преобразований имеем:

$$M^2(T) = \frac{1}{N} \frac{1 - \tanh^N K}{1 + \tanh^N K} e^{2K}, \quad (7)$$

причем $M^2(T) \rightarrow 1$ при $T \rightarrow 0$ и $\forall N$. Это обстоятельство, связано с тем, что при $T \rightarrow 0$ в статистической сумме начинают превалировать члены с большой отрицательной энергией взаимодействия.

Из (7) следует, что для любого конечного N в одномерной модели спинов Изинга и конечной температуры $T > 0$ значение среднеквадратичной намагниченности отлично от нуля, в то время как среднее значение намагниченности всегда равно нулю.

На рис. 1а представлена зависимость $M^2(T)$ для $J=1$, $k=1$. Цифры рядом с кривыми означают порядок числа частиц N . В случае одномерной системы

фактически макроскопических масштабов – 10^9 частиц – существует отличная от нуля температура магнитного упорядочения. Равенство $M=0$ при $M^2 \neq 0$, обусловлено флуктуациями магнитного момента системы. Отметим, что увеличение количества частиц в системе приводит к более выраженному переходу в состояние, где $M^2(T)=1$. Более того, даже в случае $N \rightarrow \infty$ и в очень слабом (по сравнению с обменным) внешнем поле имеет место резкий рост магнитного момента практически до $M=1$. Это наводит на мысль о том, что даже слабое магнитное поле может существенно влиять на температуру фазового перехода.

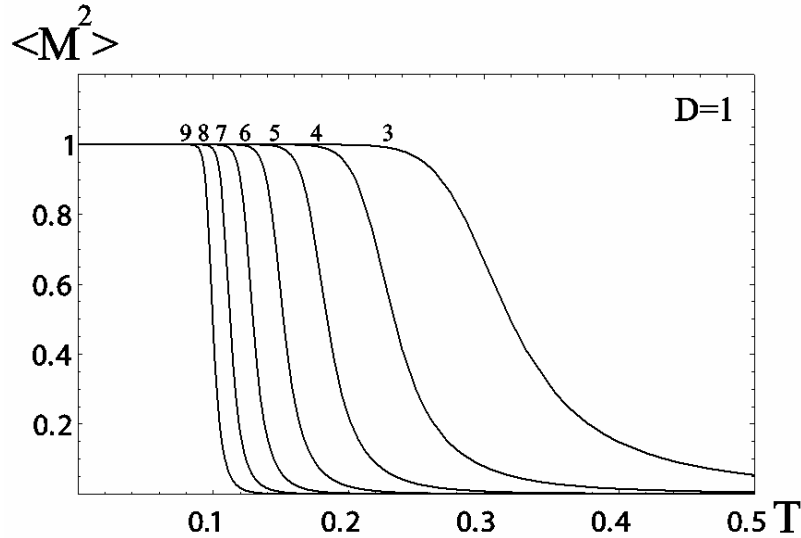


Рис. 1а. Зависимость среднеквадратичной намагниченности от температуры для 1D модели Изинга.

$M^2(T)=1$ при $M(T)=0$, связано с тем, что при $T \rightarrow 0$ в статистической сумме начинают превалировать члены с большой отрицательной энергией взаимодействия. Так, например, вероятность реализации состояния с магнитным моментом N и вероятность магнитного момента равного нулю, соответственно,

$$P(M = N) = \frac{e^{2K}}{Z_N}, \quad P(M = 0) = \frac{1}{Z_N} \frac{N!}{(N/2)^2} \approx \frac{2^N}{Z_N} \left(\frac{2}{\pi N} \right)^{1/2} \quad (8)$$

Становятся одинаковыми по значению при температуре, определяемой из соотношения (при $N \gg 1$)

$$\frac{1}{T} = \ln 2 + \frac{1}{2N} \ln \frac{2}{2\pi N} \approx \ln 2. \quad (9)$$

Окончательное упорядочение наступает при температуре T_s , для которой

$$\frac{2e^{\frac{N}{T_s}}}{Z_N} \gg \frac{N}{1!} \frac{2e^{\frac{N-2}{T_s}}}{Z_N}, \quad \text{или} \quad T_s < \frac{1}{\ln \sqrt{N}}. \quad (10)$$

Из (10) следует, что температура перехода к упорядоченному состоянию $T_s(N)$ обратно пропорциональна $\log N$. Отсюда видно, что в отсутствие внешнего магнитного поля цепочке конечного числа спинов Изинга при температуре ниже критической выгоднее находиться в состояниях, где каждый спин упорядочен относительно своих соседей (рис. 1б). $T_s(N)$ определялась, как температура, при которой $M^2(T)=0.99$, т.е. температура, при которой 99% процентов магнитных моментов в узлах цепочки коллинеарны своим соседям. Эту зависимость можно представить как $T_s^{-1}(N) \sim 0.87 + 1.15(\log N)$. Обращение в нуль среднего магнитного момента $M(T)$ системы при $B=0$ связано с тем, что в состоянии термодинамического равновесия вектор $\mathbf{M}$ в интервале температур $0 < T < T_s$ флуктуирует как целое.

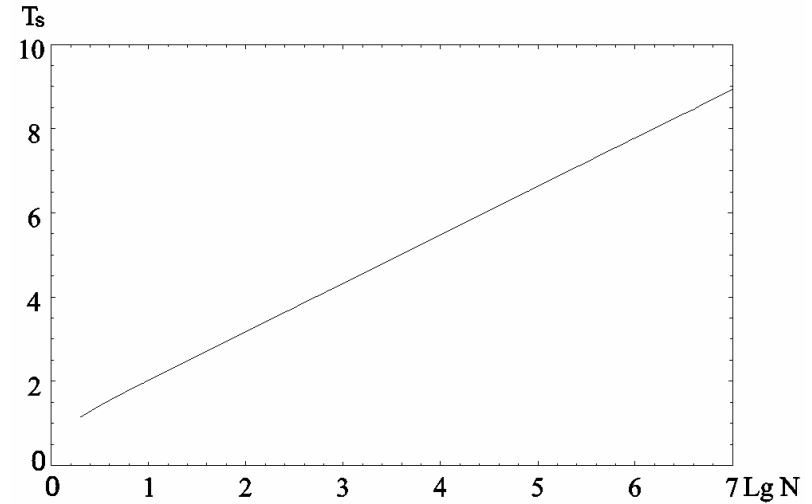


Рис. 1б. Критические температуры для заданного числа частиц.

Очевидно, что для системы конечного числа спинов этот вывод не зависит от размерности системы: симметрия модели Изинга не выделяет преимущественно-го направления $\mathbf{M}$. Однако, время релаксации системы с большим числом частиц при наличии анизотропии может быть очень большим, и случайным образом оказавшись в одном из двух равновероятных состояний система будет заблокирована в нем на длительное время.

2D модель Для плоской решетки и конечного, но достаточно большого числа спинов можно воспользоваться формулой, приведенной в работе [4]. Из нее следует

$$U = \frac{dF}{dK} = 2 \tanh 2K + \frac{1}{2LL'} \sum_{m=1}^{L-1} \sum_{n=1}^{L'-1} \frac{(\cosh 4K - 3) \sec 2K}{\cosh^2 4K} \frac{\cos \frac{2m\pi}{L} + \cos \frac{2n\pi}{L'} - \sinh 2K}{\cosh 4K}. \quad (12)$$

Суммирование в (12) следует проводить от $n, m=1$ до $L-1, L'-1$, чтобы исключить разрыв первого рода в U при суммировании от 0 до L .) К сожалению,

точное выражение для статистической суммы при $B \neq 0$ отсутствует, однако в данном случае можно ориентироваться на температуру фазового перехода, в которой теплоемкость для конечного числа частиц должна иметь резкий максимум. Только для малого числа спинов задача может быть решена точно. Результаты расчетов представлены на рис. 2, где изображено поведение $M^2(T)$ плоской модели Изинга для $N=16; 25; 36$. Имеет место достаточно резкий рост магнитного момента вблизи температуры фазового перехода, вычисленной Онсагером, $T_c=2.269$.

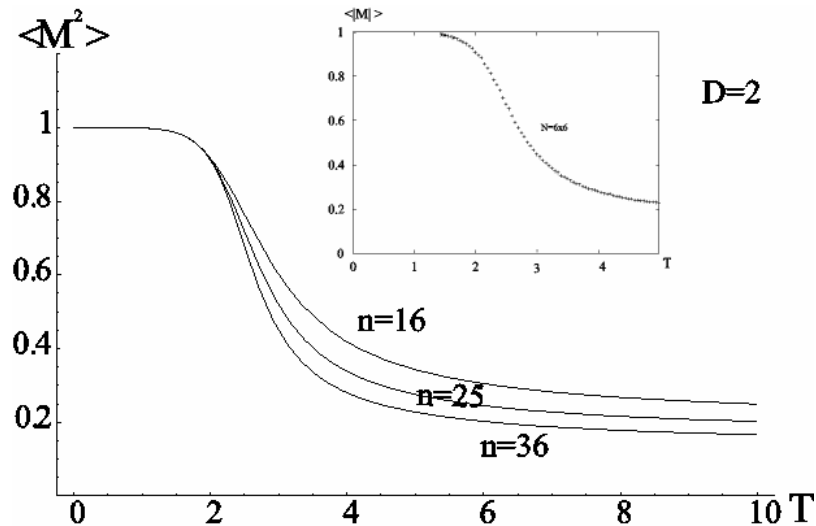


Рис. 2. Зависимость среднеквадратичной намагниченности в 2D модели Изинга для решеток из 4×4 , 5×5 и 6×6 спинов. На вставке приведена зависимость среднего модуля, полученная численным моделированием решетки 6×6 , для 10^5 Монте-Карло проходов.

Поведение средней намагниченности $|\langle M \rangle|$ и среднего модуля намагниченности $\langle |M| \rangle$ в зависимости от температуры, полученные в результате численного моделирования плоской решетки 100×100 для 2×10^5 Монте-Карло проходов, приводятся на рис. 3. Температурное поведение теплоемкости $c_m(T)$ приведено на рис. 4, где кривая 1 соответствует теплоемкости плоской системы с линейными параметрами $L=L'=10^2$, кривая 2 соответствует $L=10$ и $L'=10^3$. Уменьшение одного из линейных размеров плоской решетки приводит к «размыванию» пика теплоемкости. Очевидно, что система таких спинов при $M^2 \rightarrow 1$ будет обладать свойствами суперамагнитной частицы, время релаксации для которой будет зависеть от магнитной анизотропии.

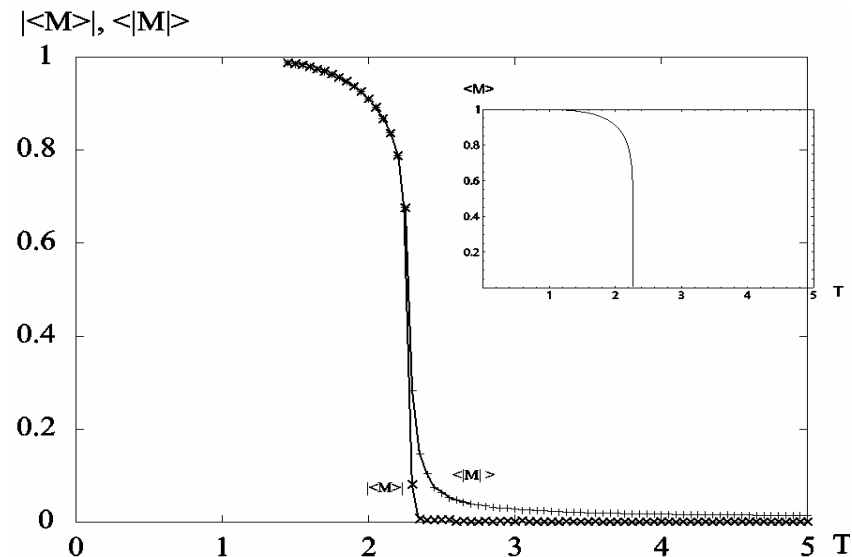


Рис. 3. Зависимость средней намагниченности и модуля намагниченности от температуры. Численный и теоретический (вкладка [4]) результаты.

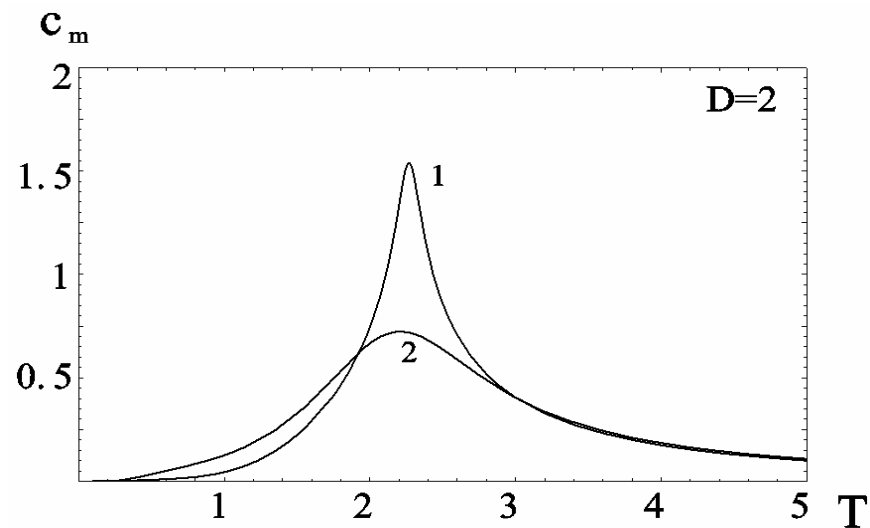


Рис. 4. Зависимость теплоемкости для конечных 2D систем спинов Изинга.

Нами проведено численное моделирование процессов обращения намагниченности в двумерных системах конечного числа спинов Изинга (рис. 5 – температура численного эксперимента $T=2$). На вкладке представлена зависимость средней намагниченности от числа Монте-Карло проходов). Среднее время обращения знака намагниченности экспоненциально зависит от числа спинов в системе. В такой модели смена знака намагниченности происходит, когда термодинамические

флуктуации отдельных спинов объединяются в достаточно большую флуктуацию, после которой процесс обращения становится уже необратимым.

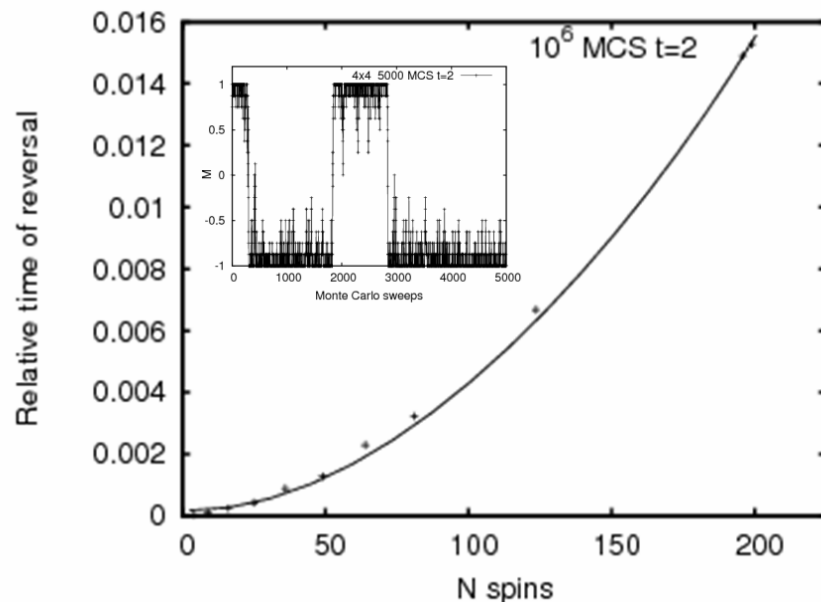


Рис. 5. Зависимость среднего времени обращения намагниченности от числа частиц в конечных 2D системах спинов Изинга.

Заключение В модели Изинга состояния упорядочения одномерной конечной системы могут быть описаны с помощью среднеквадратичной намагниченности, которая отлична от нуля при отличной от нуля температуре. Если величина $M^2(T) \approx 1$ при средней намагниченности $M=0$ для $T \neq 0$, это означает, что практически все спины в системе упорядочены относительно друг друга при конечной температуре, и система таких частиц при учете энергии анизотропии должна вести себя как суперпарамагнитное зерно. Наличие таких структур в природных ферромагнетиках может заметно влиять на рост и спад намагниченности во времени.

1. С.В. Вонсовский. Магнетизм// М.: Наука, 1971. с. 1032.
2. Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике// М.: Мир, 1985. с. 488.
3. M.T.J. Newman, G.T. Barkema. Monte Carlo methods in statistical physics// Oxford University Press Inc. New York, 2001. p. 495.
4. Р. Фейман. Статистическая механика// М.: Мир, 1975. с. 407.

ВРАЩЕНИЕ И СМЕЩЕНИЕ ТЕРРЕЙНОВ АМУРСКОЙ ПЛИТЫ ОТНОСИТЕЛЬНО СИБИРСКОГО И СИНО-КОРЕЙСКОГО КРАТОНОВ В ФАНЕРОЗОЕ

Ю. С. Брештейн, А.С. Каретников

Институт тектоники и геофизики ДВО РАН, Хабаровск, (yurybr2007@yandex.ru)

Геодинамические построения, основанные на анализе результатов геолого-геофизических исследований, могут быть существенно уточнены с помощью палеомагнитных данных, позволяющих проследить кинематические трансформации отдельных геоблоков в пространстве и времени. Использование палеомагнитных параметров дает возможность оценить мерой и числом величину соответствующих угловых разворотов и широтных смещений литосферных плит и тектоно-стратиграфических террейнов друг относительно друга на протяжении различных периодов геологической истории.

За минувшее десятилетие проводилось палеомагнитное изучение терригенно-метаморфогенных комплексов протерозоя и фанерозоя на юге Дальнего Востока России в пределах Амурской плиты (АП) [1], располагающейся между Сибирским (СП) и Северо-Китайским или Сино-Корейским (СКП) кратонами и отождествляемой с центральной и восточной частями Центрально-Азиатского орогенного пояса (рис. 1).

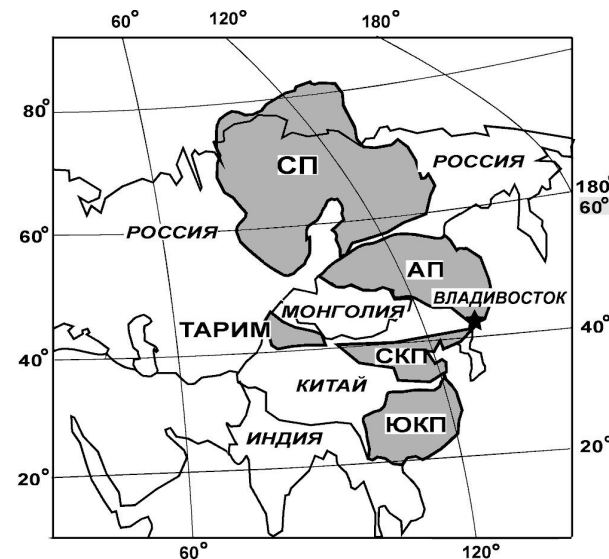


Рис. 1. Схема расположения основных литосферных плит: СП – Сибирская, АП – Амурская, СКП – Северо-Китайская, ТА – Таримская, ЮКП – Южно-Китайская.

В настоящее время считается общепризнанным, что литосферная плита Палеоазиатского океана включала микроконтиненты и террейны гондванского происхождения, которые в результате амальгамации на протяжении среднего-позднего фанерозоя сформировали Амурскую плиту. Последняя в процессе позднеюрской меловой коллизии Северо-Китайского континента с Сибирской