ФИЗИКА

Челябинский физико-математический журнал. 2020. Т. 5, вып. 4, ч. 1. С. 463–470.

УДК 537.634 DOI: 10.47475/2500-0101-2020-15406

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРИРОВАННОЙ НАНОСИСТЕМЕ

С. В. Белим[1,2,a], И. В. Бычков[3,4,b], Д. А. Кузьмин[3,4,c], В. Г. Шавров[5,d]

[1] *Омский государственный технический университет, Омск, Россия*
[2] *Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет, Омск, Россия*
[3] *Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*
[4] *Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия*
[5] *Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия*
[a] *sbelim@mail.ru,* [b] *bychkov@csu.ru,* [c] *kuzminda@csu.ru,* [d] *shavrov@cplire.ru*

Выполнено компьютерное моделирование структурированных двумерных ферромагнитных наносистем на подложке. Подложка формирует острова из атомов. Такая система получила название спинового льда. Взаимодействие между островами носит обменный характер и является более слабым, чем внутри острова. Проведён компьютерный эксперимент. Вычислена зависимость температуры фазового перехода от интенсивности взаимодействия между островами.

Ключевые слова: *спиновый лёд, структурированная наносистема, фазовый переход, ферромагнитная наносистема.*

Введение

В последнее время развивается новый подход, связанный с изготовлением и изучением самоорганизованных собраний магнитных наночастиц [1–4]. Они представляют собой аналогию с обычными кристаллическими материалами, в которых атомы замещаются магнитными наночастицами, а спины заменяются суперспинами. Исследования [5] основного состояния взаимодействующих диполей с конечным размером показали, что магнитное поведение аналогично поведению точечных диполей. Вместо атомарного кристалла говорят о супракристаллах, или сверхрешётках магнитных наночастиц [2; 3]. Такие системы представляют собой новый класс материалов. Их свойства определяются, с одной стороны, свойствами отдельных магнитных наночастиц, а с другой стороны, коллективным поведением наночастиц. Магнитные свойства сверхрешёток магнитных наночастиц были в центре внимания многих исследований [2; 6–8]. Коллективное магнитное поведение сверхрешётки является следствием обменного взаимодействия граничных спинов наночастиц.

Постановка задачи, разработка модели, анализ результатов и подготовка публикации осуществлялись при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 19-07-00246, 20-07-00053, 20-07-00466, 20-37-70038), Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание, договор № 075-00250-20-03, проект № 1503, и Акт 211 Правительства Российской Федерации, соглашение № 02.A03.21.0011). Численное моделирование проведено за счет средств гранта РНФ (грант № 20-19-00745).

Одной из разновидностей сверхрешёток магнитных наночастиц являются искусственные спиновые льды (ASI). ASI представляют собой массивы взаимодействующих магнитных наноостровков. Искусственный спиновый лёд литографически структурируют в различных решётчатых структурах. Острова достаточно малы, чтобы они были однодоменными. Изменяя форму островов, можно добиться реализации различных спиновых моделей. Для реализации модели Изинга используют острова, сильно вытянутые вдоль одной из осей [9–12]. Для реализации модели Гейзенберга может быть использована $3D$-структура типа спинового льда со сферическими наночастицами [13; 14]. Компьютерное моделирование подобных $2D$-систем выполнено в работах [15–17].

В данной статье проведено компьютерное моделирование фазового перехода в двумерном спиновом льде с островами квадратной формы.

1. Описание системы и компьютерный эксперимент

Рассмотрим $2D$-систему из спинов, расположенных в узлах квадратной сетки. Ограничимся моделью Изинга. Каждый спин S_{ij} может принимать одно из двух значений ($1/2$ или $-1/2$). Все спины разбиты на квадратные островки размером $n \times n$. Обменное взаимодействие между соседними спинами внутри одного островка равно J_0. Обменное взаимодействие между соседними спинами, находящимися в разных островках, равно J_1. Расстояние между спинами на соседних островках больше, чем расстояние на одном островке. Обменный интеграл убывает с расстоянием. Для обменных интегралов будет выполняться неравенство $J_1 < J_0$. Геометрия системы представлена на рис. 1.

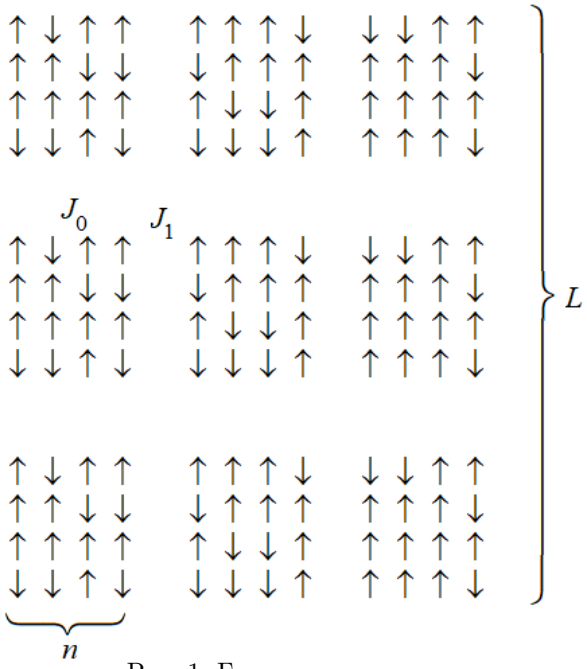

Рис. 1. Геометрия системы

Запишем гамильтониан такой системы:

$$H = \sum_{i,j,k,l=0}^{L-1} J(i,j,k,l) S_{ij} S_{k,l},$$

$S_{i,j}$ — значение спина в узле с координатами (i,j), L — линейный размер системы.

Обменный интеграл зависит от координат спинов:

$$J(i,j,k,l) = \begin{cases} 0, & |i-k|>1 \text{ и } |j-l|>1, \\ J_1, & i=4m+3 \text{ или } j=4m+3 \ (m=1,2,\dots), \\ J_0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В компьютерном моделировании используем приведённый обменный интеграл $R_1 = J_1/J_0$. Запишем приведённый гамильтониан:

$$H = \sum_{i,j,k,l=0}^{L-1} R(i,j,k,l) S_{ij} S_{k,l},$$

$$R(i,j,k,l) = \begin{cases} 0, & |i-k|>1 \text{ и } |j-l|>1, \\ R_1, & i=4m+3 \text{ или } j=4m+3 \ (m=1,2,3,...), \\ 1, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (1)$$

Также будем использовать приведённую температуру $T = kt/J_0$, где k — постоянная Больцмана.

Будем использовать алгоритм Вольфа для компьютерного моделирования [18]. Применим периодические граничные условия. Будем использовать значение намагниченности системы на один спин как параметр порядка системы

$$m = \left(\sum_{i,j=0}^{L-1} S_{ij} \right) \Big/ L^2.$$

Вычислим куммулянты Биндера четвёртого порядка [19] для определения температуры фазового перехода T_c: $U = 1 - 3\langle m^4 \rangle \langle m^2 \rangle^{-2}$. Угловые скобки означают термодинамическое усреднение по состояниям системы. Построим графики зависимости куммулянтов Биндера от температуры для систем с различными линейными размерами L. Графики куммулянтов Биндера пересекаются в одной точке. Точка пересечения графиков определяет температуру фазового перехода [20].

В компьютерном эксперименте изучались системы с линейным размером от $L = 16$ до $L = 48$ с шагом $\Delta L = 4$. Размер островков выбран равным $n = 4$. Система исследовалась при отношениях обменных интегралов от $R_1 = 0.1$ до $R_1 = 0.9$ с шагом $\Delta R_1 = 0.1$. Исследовалась зависимость температуры фазового перехода T_c от отношения обменных интегралов R_1. Для всех систем число шагов Монте-Карло на спин было равно $8 \cdot 10^5$. По результатам компьютерного эксперимента построена зависимость температуры Кюри системы T_c от отношения обменных интегралов R_1 (рис. 2).

Как видно из рис. 2 температура фазового перехода растёт нелинейно с увеличением значения обменного интеграла взаимодействия соседних островов. Эта нелинейность связана с тем, что исследуемая система представляет собой двумерную решётку с изменяющимся взаимодействием между соседними спинами. Взаимодействие между частью спинов, расположенных внутри наноостровов, остаётся неизменным. Между спинами, лежащими на границах соседних островов, взаимодействие определяется параметром R_1.

Заключение

Компьютерное моделирование показало, что параметры фазового перехода в двумерном спиновом льде отличаются от характеристик двумерной модели Изинга.

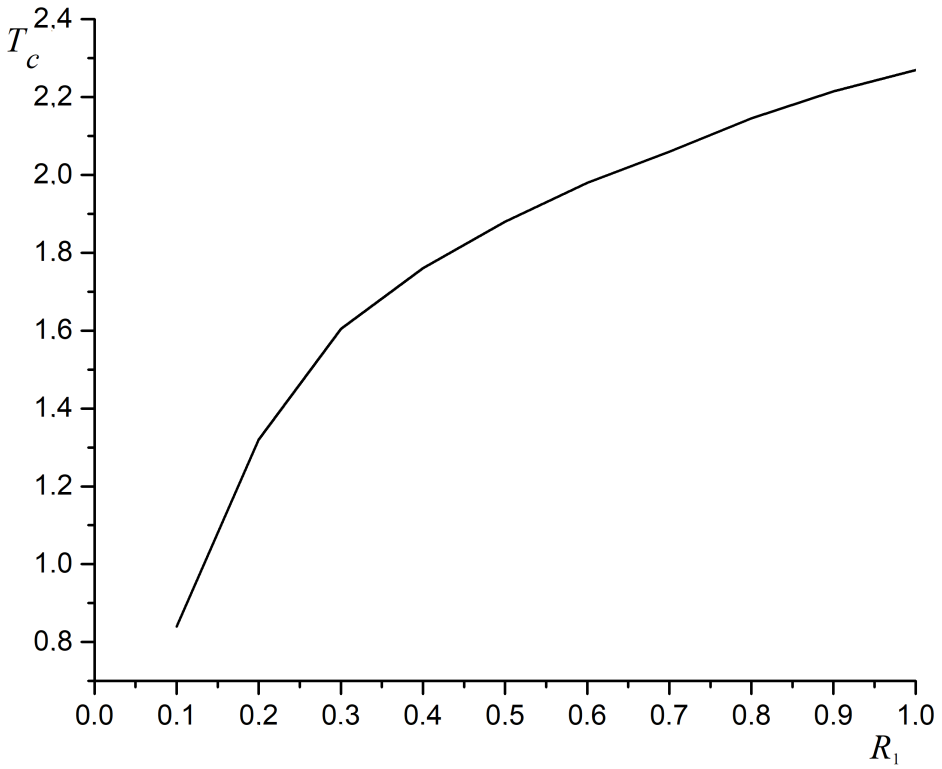

Рис. 2. Зависимость температуры фазового перехода T_c от отношения обменных интегралов R_1

При увеличении расстояния между наноостровами происходит уменьшение величины обменного взаимодействия между ними. Это снижение сил взаимодействия приводит к уменьшению температуры фазового перехода всей системы, несмотря на неизменное значение обменного интеграла между спинами внутри наноостровов. Следует отметить, что температура фазового перехода убывает нелинейно с уменьшением взаимодействия между наноостровами. Из этого можно сделать вывод о том, что спиновый лёд не эквивалентен двумерной модели Изинга с изменённым обменным интегралом, а представляет новый класс универсальности критического поведения.

Список литературы

1. **Hellwig, O.** Competing interactions in patterned and self-assembled magnetic nanostructures / O. Hellwig, L. J. Heyderman, O. Petracic, H. Zabel // Springer Tracts in Modern Physics. — 2003. — Vol. 246. — P. 189–234.
2. **Redl, F.** Three-dimensional binary superlattices of magnetic nanocrystals and semiconductor quantum dots / F. Redl, K. Cho, C. Murray et al. // Nature. — 2003. — Vol. 423. — P. 968–971.
3. **Pileni, M. P.** Supracrystals of inorganic nanocrystals: an open challenge for new physical properties / M. P. Pileni // Accounts of Chemical Research. — 2008. — Vol. 41. — P. 1799–1809.
4. **Claridge, S. A.** Cluster-Assembled Materials / S. A. Claridge, Jr. A. W. Castleman, S. N. Khanna et al. // ACS Nano. — 2009. — Vol. 3. — P. 244–255.
5. **Jensen, P. J.** Low-energy properties of two-dimensional magnetic nanostructures: interparticle interactions and disorder effects / P. J. Jensen // Physica Status Solidi A. — 2002. — Vol. 189. — P. 527–550.
6. **Sun, S.** Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices / S. Sun, C. B. Murray, D. Weller et al. // Science. — 2000. — Vol. 287. — P. 1989–1992.

7. **Benitez, M. J.** Structural and magnetic characterization of self-assembled iron oxide nanoparticle arrays / M. J. Benitez, D. Mishra, P. Szary et al. // Journal of Physics Condensed Matter. — 2011. — Vol. 23. — P. 126003.
8. **Disch, S.** Shape Induced Symmetry in Self-Assembled Mesocrystals of Iron Oxide Nanocubesal / S. Disch, E. Wetterskog, R. P. Hermann et al. // Nano Letters. — 2011. — Vol. 11. — P. 1651–1656.
9. **Castelnovo, C.** Magnetic monopoles in spin ice / C. Castelnovo, R. Moessner, S. Sondhi // Nature. — 2008. — Vol. 451. — P. 42–45.
10. **Chern, G.-W.** Two-stage ordering of spins in dipolar spin ice on the Kagome lattice / G.-W. Chern, P. Mellado, O. Tchernyshyov // Physical Review Letters. — 2011. — Vol. 106. — P. 207202.
11. **Li, Y.** Superferromagnetism and domain-wall topologies in artificial "Pinwheel"spin ice / Y. Li, G. W. Paterson, G. M. Macauley et al.// ACS Nano. — 2019. — Vol. 13. — P. 2213–2222.
12. **Stancioli, R. A.** Intermediate phase and pseudo phase transition in an artificial spin ice model / R. A. Stancioli, L.A.S. Mol // Physical Review B. — 2019. — Vol. 100. — P. 024432.
13. **Granitzer, P.** Magnetic nanoparticles embedded in a silicon matrix / P. Granitzer, K. Rumpf // Materials. — 2011. — Vol. 4. — P. 908–928.
14. **Gilbert, I.** Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice / I. Gilbert, G. Chern, S. Zhang et al. // Nature Physics. — 2014. — Vol. 10. — P. 670–675.
15. **Lee, H. K.** Monte Carlo simulations of interacting magnetic nanoparticles / H. K. Lee // Journal of Applied Physics. — 2002. — Vol. 91. — P. 6926.
16. **Kechrakos, D.** Competition between dipolar and exchange interparticle interactions in magnetic nanoparticle films / D. Kechrakos, K. N. Trohidou // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2003. — Vol. 262. — P. 107–110.
17. **Baldomir, D.** Magnetocaloric effects in magnetic nanoparticle systems: A Monte Carlo study / D. Baldomir, J. Rivas, D. Serantes et al. // Journal of Non-Crystalline Solids. — 2007. — Vol. 353. — P. 790–792.
18. **Wolff, U.** Collective Monte Carlo updating for spin systems / U. Wolff // Physical Review Letters. — 1989. — Vol. 62. — P. 361–364.
19. **Binder, K.** Critical properties from Monte-Carlo coarse-graining and renormalization / K. Binder // Physical Review Letters. — 1981. — Vol. 47. — P. 693–696.
20. **Landau, D. P.** Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet / D. P. Landau, K. Binder // Physical Review B. — 1978. — Vol. 17. — P. 2328–2342.

Поступила в редакцию 11.09.2020.
После переработки 11.10.2020.

Сведения об авторах

Белим Сергей Викторович, профессор физико-математических наук, профессор, доцент кафедры физики, Омский государственный технический университет, Омск, Россия; профессор кафедры прикладной информатики, Сибирский государственный автомобильно-дорожный университет, Омск, Россия; e-mail: sbelim@mail.ru.

Бычков Игорь Валерьевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия; научный сотрудник лаборатории функциональных материалов, Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия; e-mail: bychkov@csu.ru.

Кузьмин Дмитрий Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия; научный сотрудник лаборатории функциональных материалов, Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия; e-mail: kuzminda@csu.ru.
Шавров Владимир Григорьевич, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией магнитных явлений в микроэлектронике, Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия; e-mail: shavrov@cplire.ru.

Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal. 2020. Vol. 5, iss. 4, part 1. P. 463–470.

DOI: 10.47475/2500-0101-2020-15406

PHASE TRANSITION STUDY IN TWO-DIMENSIONAL STRUCTURED NANOSYSTEM

S.V. Belim[1,2,a], I.V. Bychkov[3,4,b], D.A. Kuzmin[3,4,c], V.G. Shavrov[5,d]

[1] *Omsk State Technical University, Omsk, Russia*
[2] *Siberian State Automobile and Highway University, Omsk, Russia*
[3] *Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia*
[4] *South Ural State University (National Research University), Chelyabinsk, Russia*
[5] *Kotelnikov Institute of Radio-Engineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*
[a] *sbelim@mail.ru,* [b] *bychkov@csu.ru,* [c] *kuzminda@csu.ru,* [d] *shavrov@cplire.ru*

Computer simulation of structured two-dimensional ferromagnetic nanosystems on a substrate is performed. The substrate forms islands of atoms. Such a system is called the spin ice. The interaction between the islands is exchange-based and weaker than within the island. A computer experiment allows to calculate the dependence of the phase transition temperature on the interaction between the islands.

Keywords: *spin ice, structured nanosystem, phase transition, ferromagnetic nanosystem.*

References

1. **Hellwig O., Heyderman L.J., Petracic O., Zabel H.** Competing interactions in patterned and self-assembled magnetic nanostructures. *Springer Tracts in Modern Physics*, 2013, vol. 246, pp. 189–234.
2. **Redl F., Cho K., Murray C. et al.** Three-dimensional binary superlattices of magnetic nanocrystals and semiconductor quantum dots. *Nature*, 2003, vol. 423, pp. 968–971.
3. **Claridge S.A., Castleman Jr. A.W., Khanna S.N. et al.** Cluster-assembled materials. *ACS Nano*, 2009, vol. 3, pp. 244–255.
4. **Pileni M. P.** Supracrystals of inorganic nanocrystals: an open challenge for new physical properties. *Accounts of Chemical Research*, 2008, vol. 41, pp. 1799–1809.
5. **Jensen P.J., Pastor G.M.** Low-energy properties of two-dimensional magnetic nanostructures: interparticle interactions and disorder effects. *Physica Status Solidi A*, 2002, vol. 189, pp. 527–550.
6. **Sun S., Murray C.B., Weller D. et al.** Monodisperse FePt nanoparticles and ferromagnetic FePt nanocrystal superlattices. *Science*, 2000, vol. 287, pp. 1989–1992.
7. **Benitez M.J., Mishra D., Szary P. et al.** Structural and magnetic characterization of self-assembled iron oxide nanoparticle arrays. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2011, vol. 23, p. 126003.
8. **Disch S., Wetterskog E., Hermann R.P. et al.** Shape induced symmetry in self-assembled mesocrystals of iron oxide nanocubesal. *Nano Letters*, 2011, vol. 11, pp. 1651–1656.
9. **Castelnovo C., Moessner R., Sondhi S.** Magnetic monopoles in spin ice. *Nature*, 2008, vol. 451, pp. 42–45.

The statement of the problem, the development of the model, the analysis of the results and the preparation of the publication were carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research (projects no. 19-07-00246, 20-07-00053, 20-07-00466, 20-37-70038), the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (the Russian State Assignment, contract no. 075-00250-20-03, project no. 1503, and Act 211 of the Government of the Russian Federation, contract no. 02.A03.21.0011). Numerical modeling was carried out at the expense of the Russian Science Foundation grant (grant no. 20-19-00745).

10. **Chern G.-W., Mellado P., Tchernyshyov O.** Two-stage ordering of spins in dipolar spin ice on the Kagome lattice. *Physical Review Letters*, 2011, vol. 106, p. 207202.
11. **Li Y., Paterson G.W., Macauley G.M. et al.** Superferromagnetism and domain-wall topologies in artificial "Pinwheel" spin ice. *ACS Nano*, 2019, vol. 13, pp. 2213–2222.
12. **Stancioli R.A., Mol L.A.S.** Intermediate phase and pseudo phase transition in an artificial spin ice model. *Physical Review B*, 2019, vol. 100, p. 024432.
13. **Granitzer P., Rumpf K.** Magnetic nanoparticles embedded in a silicon matrix. *Materials*, 2011, vol. 4, pp. 908–928.
14. **Gilbert I., Chern G., Zhang S. et al.** Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice. *Nature Physics*, 2014, vol. 10, pp. 670–675.
15. **Lee H.K.** Monte Carlo simulations of interacting magnetic nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 2002, vol. 91, p. 6926.
16. **Kechrakos D., Trohidou K.N.** Competition between dipolar and exchange interparticle interactions in magnetic nanoparticle films. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2003, vol. 262, pp. 107–110.
17. **Baldomir D., Rivas J., Serantes D. et al.** Magnetocaloric effects in magnetic nanoparticle systems: A Monte Carlo study. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2007, vol. 353, pp. 790–792.
18. **Wolff U.** Collective Monte-Carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, 1989, vol. 62, pp. 361–364.
19. **Binder K.** Critical properties from Monte-Carlo coarse-graining and renormalization. *Physical Review Letters*, 1981, vol. 47, pp. 693–696.
20. **Landau D.P., Binder K.** Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet. *Physical Review B*, 1978, vol. 17, pp. 2328–2342.

Accepted article received 11.09.2020.
Corrections received 11.10.2020.