Письма в ЖЭТФ, том 97, вып. 9, с. 601 – 606 © 2013 г. 10 мая

Возбуждение фазовых переходов в дипольных решетках

А. М. Шутый[1)]

Ульяновский государственный университет, 432970 Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 27 марта 2013 г.

Исследуются фазовые переходы в гексагональных решетках с тремя и четырьмя рядами диполей, возникающие в результате переориентации внешним полем различных наборов диполей. Выявлены условия реализации двух типов симметричных фазовых переходов, а также несимметричных переходов, когда конфигурации системы слева и справа от области возбуждения различны. Рассмотрено слияние двух областей фазовых переходов. В решетке с четырьмя рядами диполей получены односторонние фазовые переходы, при которых от области возбуждения вдоль решетки распространяется либо только левый, либо только правый фронт фазового перехода. Дано изменения суммарного дипольного момента системы и энергии диполь-дипольного взаимодействия при возникновении фазовых переходов.

DOI: 10.7868/S0370274X1309004X

1. Интерес к самоорганизующимся системам, в том числе и к ансамблям наночастиц, особенно возрос в связи с достижениями в области информационных технологий и наноструктур. Накопители информации, изготовленные на основе массивов из магнитных диполей, являются одним из наиболее перспективных видов запоминающих устройств. Кроме того, ансамбли однодоменных частиц служат удобными объектами для изучения самоорганизации, фазовых переходов и других коллективных эффектов вследствие их формирования хорошо определенным взаимодействием и возможности эффективного управления их состоянием. В последние годы ведется систематическое изучение и внедрение в практику создаваемых нанотехнологиями [1] магнитных сверхструктур. Среди них особый интерес представляют двумерные сверхструктуры, в частности в виде решеток наночастиц с формой, близкой к круговой [2]. Упорядоченные структуры ферромагнитных наночастиц могут быть сформированы методом нанолитографии [3] с использованием в качестве диполей состоящих из атомов железа наночастиц размером около 10 нм [4]. При этом магнитный момент наночастиц можно считать классической величиной. В случае однодоменного состояния наночастиц основной вклад в их взаимодействие вносит диполь-дипольное взаимодействие [3, 5]. Уже сейчас разброс наночастиц по размерам при соответствующем контроле может не превышать 5% [6].

Для задач сверхплотной записи и хранения информации наиболее актуальным является изучение формируемых в дипольных решетках доменов и осуществляемых фазовых переходов, меняющих ориентационную конфигурацию решеток. Последнее обусловлено тем, что в решетках с различной исходной ориентацией диполей устанавливаются разные минимальные по размеру и устойчивости доменные структуры [7]. В настоящей работе исследуются условия реализации нескольких видов фазовых переходов в гексагональных решетках, состоящих из трех и четырех рядов диполей. Показано, что при действии внешнего поля на определенные комплексы диполей удается получить разные фазовые переходы, в том числе симметричные и несимметричные (относительно области возбуждения), а также однонаправленные фазовые переходы, имеющие только левый или только правый фронт распространения. Проводится расчет суммарного дипольного момента системы и энергии связи диполей, изменяющихся при развитии фазовых переходов.

2. Рассматривая систему диполей, мы полагаем, что каждый из них связан с другими диполь-дипольным взаимодействием и способен поворачиваться вокруг центра симметрии. Положение диполей в решетке считается неизменным. Тела с дипольными моментами полагаются однородными и шарообразными [8]. Динамические уравнения при этом имеют вид [9, 11]

$$J_i\frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt}+\alpha_i\boldsymbol{\omega}_i=\mathbf{p}_i\times\mathbf{F}_i,\qquad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt}=\boldsymbol{\omega}_i\times\mathbf{p}_i, \tag{1}$$

где $\mathbf{p}_i$ и $\boldsymbol{\omega}_i=d\boldsymbol{\varphi}_i/dt$ – дипольный момент и угловая скорость i-го диполя, φ_{ij} – угол поворота соответствующего диполя вокруг оси $j=x,y,z$ декартовой

[1)] e-mail: shuty@mail.ru

системы координат, J_i – момент инерции, α_i – параметр диссипации. Поле, создаваемое в месте расположения i-го диполя остальными диполями, в отсутствие внешнего поля определяется выражением

$$\mathbf{F}_i = \sum_{n \neq i} \left[\frac{3\mathbf{e}_{in}(\mathbf{p}_n \mathbf{e}_{in}) - \mathbf{p}_n}{l_{in}^3} \right], \qquad (2)$$

где $\mathbf{e}_{in} = \mathbf{r}_{in}/r_{in}$ – единичные векторы вдоль направления $\mathbf{r}_{in}$, $\mathbf{r}_{in}$ – вектор между расположениями i-го и n-го диполей, $l_{in} = r_{in}/a$ – расстояние, нормированное на характерный параметр конфигурации системы a. В рассматриваемых гексагональных решетках a – расстояние между ближайшими диполями. При наличии внешнего поля $\mathbf{f}$ оно добавляется к полю (2). Составляющие решетку диполи считаются идентичными: $|\mathbf{p}_i| = p$, $J_i = J$, $\alpha_i = \alpha$. Удобно сделать переход к безразмерным параметрам [9, 10]:

$$\rho_{ij} = p_{ij}/p, \quad \beta = \alpha/(\nu J), \quad \boldsymbol{\omega}_i = d\boldsymbol{\varphi}_i/d\tau, \qquad (3)$$

где $\nu = \sqrt{p^2/Ja^3}$, а дифференцирование проводится по безразмерному времени $\tau = \nu t$. Компоненты внешнего поля преобразуются к виду $\phi_j = f_j p/(\nu^2 J)$. В случае решеток, формируемых частицами с магнитным дипольным моментом, в уравнениях (1), (2) $\mathbf{F}_i$ и $\mathbf{f}$ являются напряженностями магнитных полей. В случае решеток электрических диполей в эти выражения входят напряженности электрических полей.

При численном анализе для уменьшения времени счета учитывалась связь каждого диполя только с диполями до пятого уровня окружения (т.е., в частности, в неограниченной трехрядной решетке связь каждого диполя внутреннего ряда с 32 ближайшими диполями). Предварительные исследования показали, что в некоторых случаях более грубого приближения оказывается недостаточно, а более точное является избыточным (зависимости остаются неизменными). Численный анализ проводился методом Рунге–Кутта четвертого порядка.

3. Взаимодействие дипольных моментов в неограниченных по длине решетках диполей с малым числом рядов приводит к выстраиванию диполей вдоль рядов. При этом в каждом ряду диполи оказываются сонаправленными, а диполи из соседних рядов могут либо иметь противоположную ориентацию, либо быть сонаправленными. Анализ показывает, что у рассматриваемых систем есть несколько устойчивых ориентационных конфигураций, отличающихся направлением диполей в рядах решетки, а также величиной энергии диполь-дипольного взаимодействия. Последнее приводит к возможности осуществления фазовых переходов за счет возбуждения (переориентации) отдельных частиц решетки внешним полем. В результате происходит изменение ориентации диполей некоторых из рядов решетки на противоположное. Существенно, что благодаря воздействию на различные наборы диполей при одном исходном состоянии реализуются различные фазовые переходы.

На рис. 1 и 2 показаны отдельные фазы фазовых переходов, возбуждаемых в двух близко расположенных областях решетки, для решеток с тремя и четырьмя рядами диполей соответственно. В качестве исходной выбрана конфигурация, при которой диполи соседних рядов ориентированы противоположно (как показывает дальнейшее рассмотрение, энергия взаимодействия данной конфигурации не является минимальной). Возбуждение диполей осуществляется внешним полем, направленным вдоль рядов решетки (параллельно оси y). Поле переориентирует возбуждаемые диполи (выделенные на рисунках жирной стрелкой) в направлении, противоположном исходному. Во всех случаях (здесь и далее) модуль внешнего поля равен $|\phi| = |\phi_y| = 5$. В рассматриваемых решетках реализуются два основных типа фазовых переходов, вызываемых возбуждением минимального числа диполей (одного или двух). При возбуждении одного диполя внутреннего ряда (рис. 1a и 2a) в обеих решетках реализуется фазовый переход, изменяющий на противоположную ориентацию

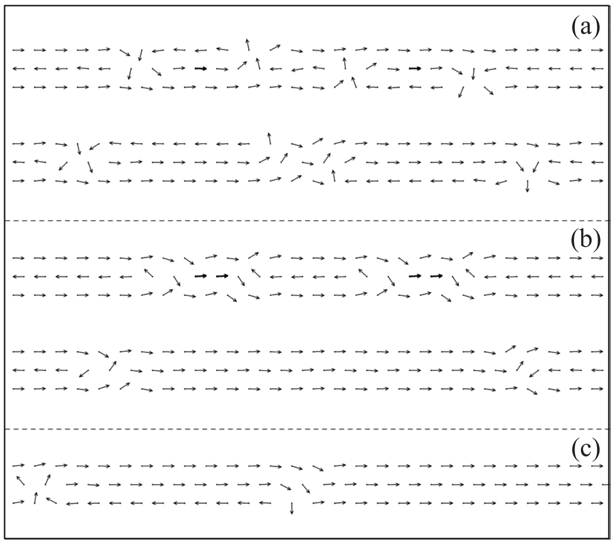

Рис. 1. Конфигурации решеток с тремя рядами диполей при слиянии двух областей фазовых переходов, вызванных возбуждением одного (a) и двух (b) диполей среднего ряда (выделены жирной стрелкой), и при слиянии областей двух различных вышеуказанных фазовых переходов (c)

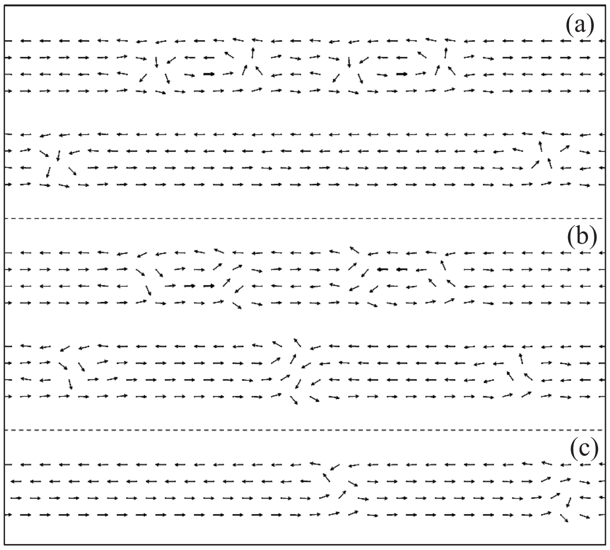

Рис. 2. Конфигурации решеток с четырьмя рядами диполей при слиянии двух областей одинаковых фазовых переходов (a), (b) и областей двух различных фазовых переходов

двух рядов диполей. При возбуждении двух соседних диполей внутреннего ряда реализуется переход, переориентирующий только один ряд системы, тот, в котором располагаются возбуждаемые диполи.

Как видно из рисунков, при слиянии двух областей первого из указанных типов фазовых переходов в случае трехрядной решетки (рис. 1a) может возникать центральная область (подобная доменной стенке), по обе стороны от которой конфигурации решетки отличаются ориентацией диполей двух рядов (при сохранении числа рядов системы, ориентированных в ту и в другую сторону). В случае четырехрядной решетки (рис. 2a) происходит объединение двух областей данных фазовых переходов. При втором из указанных фазовых переходов происходит объединение его областей в случае трехрядной решетки (рис. 1b) и возникновение "доменной стенки" в случае четырехрядной решетки (рис. 2b). Последнее имеет место, когда области фазовых переходов возникают при возбуждении диполей разных рядов. В приведенном случае левая область возникла при воздействии на два диполя второго (отсчитывая "снизу" решетки) ряда, а правая – на два диполя третьего ряда. В результате слева от "доменной стенки" распространяется вдоль решетки конфигурация с тремя рядами, ориентированными вправо, и одним рядом, ориентированным влево. Справа же от данной центральной области распространяется конфигурация с тремя рядами, ориентированными влево.

На рис. 1c и 2c показаны конфигурации, возникающие при слиянии двух областей, относящихся к разным фазовым переходам. При этом возникает стационарная "доменная стенка", по одну сторону от которой реализуется переориентация диполей одного ряда решетки (в данном случае справа от центральной области), а по другую – двух рядов. Для обеих решеток на рисунке представлен фронт одного из фазовых переходов, скорость распространения которого ниже. Видно, что в случае трехрядной решетки выше скорость у фазового перехода, меняющего ориентацию одного ряда диполей, а в случае четырехрядной решетки – у перехода, меняющего ориентацию двух рядов.

На рис. 3 для вышерассмотренных фазовых переходов приведены зависимости от времени суммарного дипольного момента системы $\mathbf{P} = \Sigma\boldsymbol{\rho}_i$ и энергии диполь-дипольного взаимодействия $W_0 = \sum\limits_i\sum\limits_k(W_{ik} - W'_{ik})/2$, где $W_{ik} = [\mathbf{p}_i\mathbf{p}_k - 3(\mathbf{p}_i\mathbf{e}_{ik})(\mathbf{p}_k\mathbf{e}_{ik})]/l_{ik}^3$ – энергия взаимодействия i-го и k-го диполей, а W'_{ik} – энергия взаимодействия между двумя диполями в исходном однородном состоянии решетки (значение энергии связи решетки в исходном состоянии принимается за нулевой уровень). Кривые *1–4* отвечают фазовым переходам на рис. 1a, b и 2a, b соответственно при единичной области их возбуждения. Видно, что в случае фазовых переходов, при которых переориентируются два ряда решетки, суммарный дипольный момент сохраняется и при движении фронтов фазового перехода испытывает близкие к гармоническим колебания с $\Delta P < 0.5$. В случае же распространения фазовых переходов, изменяющих ориентацию одного ряда диполей, суммарный дипольный момент монотонно растет. Величина дипольного момента, кратная значению $P \approx 120$, объясняется тем, что дипольные моменты одного или нескольких рядов оказываются нескомпенсированными дипольными моментами других рядов. В численном же анализе рассматривались структуры со 120 диполями в каждом ряду (большое число диполей в рядах взято для исключения влияния граничных условий на значительное продвижение вдоль решетки фронтов возбуждаемых фазовых переходов).

При фазовых переходах энергия связи, как и ожидалось, уменьшается от значения в исходной конфигурации до значения в конфигурации, устанавливающейся после фазового перехода. При этом зависимость энергии от времени может быть близкой к линейной (кривая *3*), может быть монотонной, но имеющей интервалы относительно медлен-

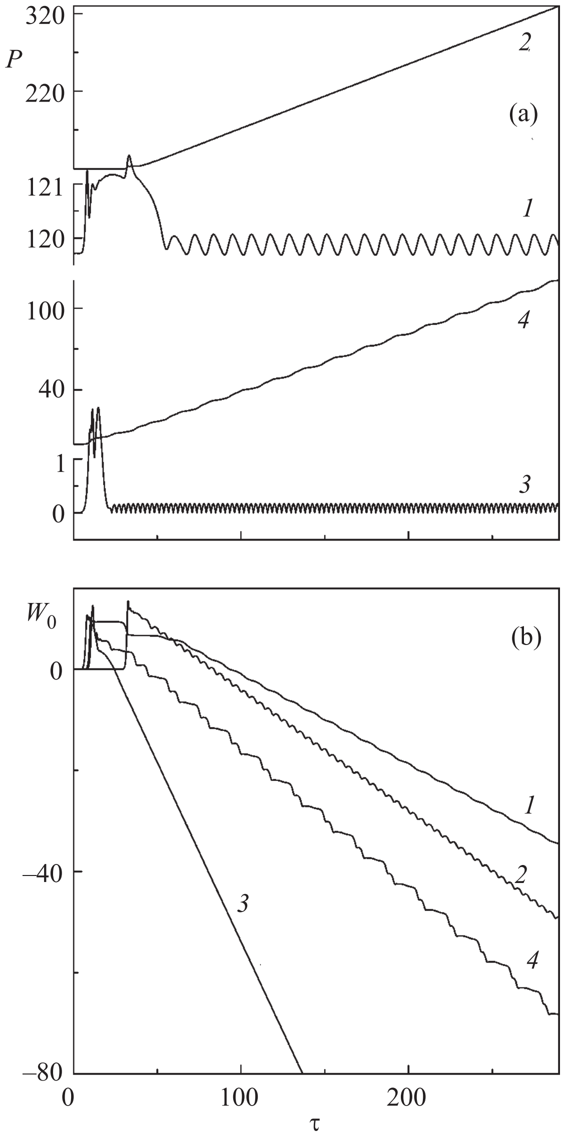

Рис. 3. Зависимость от времени величины суммарного дипольного момента системы P и энергии диполь-дипольного взаимодействия (за нулевой уровень принята энергия исходного состояния системы) при фазовых переходах, отвечающих одной области возбуждения на рис. 1a, b и 2a, b (кривые *1–4*, соответственно)

ного уменьшения, которые сменяются интервалами быстрого уменьшения (кривые *1* и *4*), или иметь интервалы уменьшения, сменяющиеся интервалами незначительного роста (кривая *2*). Частота колебаний представленных зависимостей определяется скоростью продвижения фронта фазового перехода.

4. Выбором комплекса возбуждаемых диполей в решетках достигаются более сложные несимметричные фазовые и односторонние переходы. На рис. 4 представлен несимметричный фазовый переход с

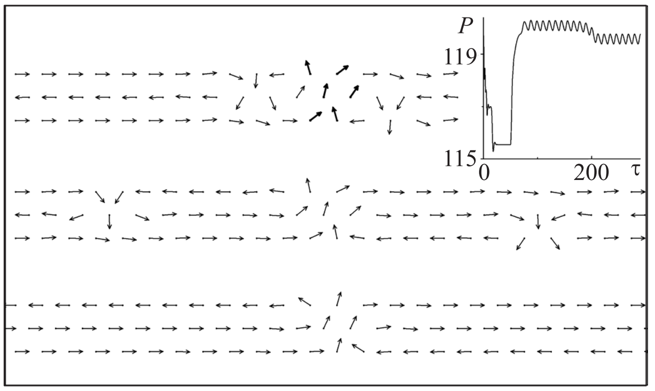

Рис. 4. Несимметричный фазовый переход, вызванный воздействием внешнего поля на выделенные жирной стрелкой диполи трехрядной решетки, и зависимость от времени суммарного дипольного момента системы при его распространении

центральной областью, разделяющей конфигурации, которые отличаются расположением одинаково направленных рядов. Данный фазовый переход аналогичен вышерассмотренному случаю слияния двух областей фазовых переходов (см. рис. 1a), однако центральная область здесь оказывается более компактной. Для возникновения фазового перехода шесть диполей (выделенных жирными стрелками, по два диполя в каждом ряду) ориентируются внешним полем в направлении оси z, т.е. перпендикулярно рядам. Суммарный дипольный момент (см. вставку) при продвижении фронта фазового перехода испытывает низкоамплитудные (< 0.5) колебания. Наблюдаемый сбой близкой к гармонической зависимости $P(\tau)$ объясняется перестройкой центральной области (разделяющей две конфигурации системы).

В решетке, содержащей четыре ряда, может быть реализовано два типа односторонних фазовых переходов, когда вдоль решетки распространяется только один (или левый, или правый) фронт фазового перехода, а противоположный фронт блокируется. На рис. 5 представлены фазовые переходы с правым распространяющимся фронтом. При ориентации внешним полем шести выделенных жирными стрелками диполей (по два диполя в первом–третьем рядах на рис. 5a) в направлении $-z$ возникает устойчивое ориентационное образование, подобное "доменной стенке". Слева от данной области ориентация рядов не меняется, а справа устанавливается конфигурация с двумя соседними рядами (первым и вторым), ориентированными вправо, и двумя рядами (третьим и четвертым), ориентированными влево. Суммарный дипольный момент (см. вставку) при продвижении фронта фазового перехода испытывает низкоампли-

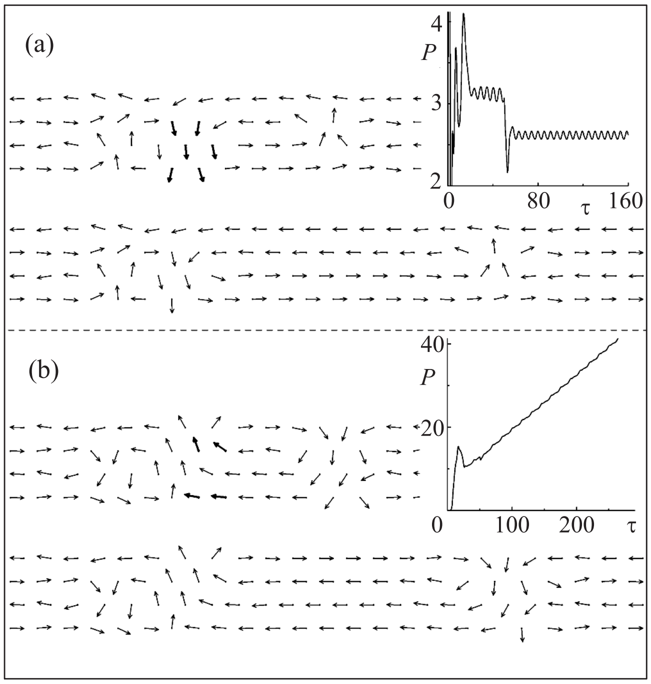

Рис. 5. Односторонние (правосторонние) фазовые переходы, вызванные воздействием внешнего поля на выделенные жирной стрелкой диполи четырехрядной решетки, и зависимость от времени суммарного дипольного момента системы

тудные колебания (отраженный на рисунке сбой зависимости обусловлен перестройкой области возбуждения, т.е. “доменной стенки”). При ориентации выделенных диполей в противоположном направлении (в направлении z) будет реализован левосторонний фазовый переход, т.е. переход с распространяющимся левым фронтом.

При ориентации внешним полем в направлении, противоположном исходному, по паре соседних диполей в первом и третьем рядах реализуется другой правосторонний фазовый переход (рис. 5b). При нем распространяющийся вправо фронт фазового перехода устанавливает конфигурацию с тремя однонаправленными рядами (противоположно направлению распространения фронта). Суммарный дипольный момент при таком фазовом переходе монотонно растет, так как справа от области возбуждения переориентируется сразу три ряда диполей. При возбуждении внешним полем по паре диполей во втором и четвертом рядах будет получен левосторонний фазовый переход: справа от области возбуждения конфигурация решетки не изменится, а распространяться вдоль решетки будет только левый фронт фазового перехода.

5. Анализ гексагональных решеток, состоящих из трех и четырех рядов диполей, выявил условия реализации в них фазовых переходов, приводящих к изменению конфигурации. Фазовые переходы осуществляются при переориентации внешним полем определенных диполей системы. При этом путем подбора возбуждаемых диполей удается реализовать различные фазовые переходы, включая как симметричные, так и не симметричные относительно области возбуждения, а также односторонние фазовые переходы, распространяющиеся вдоль решетки только в одном направлении. Для получения указанных фазовых переходов в качестве исходной следует брать конфигурацию с противоположным направлением соседних рядов системы. В частности, при воздействии на один диполь внутреннего ряда решетки возникает фазовый переход, приводящий к переориентации двух рядов системы. Суммарный дипольный момент решетки при этом не изменяется. При воздействии на два соседних диполя внутреннего ряда реализуется фазовый переход, меняющий ориентацию только одного ряда. При этом суммарный дипольный момент системы в результате продвижения фронта фазового перехода возрастает.

В результате слияния двух областей фазовых переходов могут устанавливаться различные ориентационные конфигурации системы по обе стороны от области “доменной стенки”. Аналогичные несимметричные фазовые переходы с центральной областью и различной ориентацией рядов справа и слева от нее реализуются в трехрядных решетках при возбуждении определенного набора диполей. Для решетки с четырьмя рядами диполей выявлены условия возбуждения двух разных по конфигурации односторонних фазовых переходов как только с правым, так и только с левым распространяющимся фронтом при сохранении исходной конфигурации с противоположной стороны от области возбуждения. При одном из полученных односторонних фазовых переходов происходит изменение ориентации (либо справа, либо слева от области возбуждения) двух рядов диполей, в результате чего суммарный дипольный момент системы практически не изменяется. В данном случае условия реализации правостороннего фазового перехода отличаются от условий реализации левостороннего направлением ориентации возбуждаемых диполей. При другом одностороннем фазовом переходе изменяется ориентация трех рядов и суммарный дипольный момент системы растет с продвижением фронта. В случае такого фазового перехода распространение только левого или только правого фронта реализуется при возбуждении различного набора диполей. Следует заметить, что результаты данного исследования носят общий характер и справедливы для различных дипольных систем.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и образованию в рамках федеральных целевых программ “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 годы” и “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы”, соглашение # 14.B37.21.0772.

1. R. Skomski, J. Phys.: Condens. Matter **15**, R841 (2003).
2. А. Ю. Галкин, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **83**, 450 (2006).
3. С. А. Гусев, Ю. Н. Ноздрин, М. В. Сапожников, А. А. Фраерман, УФН **170**, 331 (2000).
4. I. A. Becker, A. Chatelain, and W. A. Heer, Phys. Rev. Lett. **71**, 4067 (1993).
5. И. Р. Каретникова, И. М. Нефедов, М. В. Сапожников и др., ФТТ **43**, 2030 (2001).
6. С. П. Губин, Ю. А. Кокшаров, Неорганические материалы **38**, 1287 (2002).
7. А. М. Шутый, ЖТФ **83**, 54 (2013).
8. С. П. Губин, Ю. А. Кокшаров, Г. Б. Хомутов, Г. Ю. Юрков, Успехи химии **74**, 539 (2005).
9. Ф. В. Лисовский, О. П. Поляков, Письма в ЖЭТФ **73**, 546 (2001).
10. А. М. Шутый, ЖЭТФ **135**, 1009 (2009).
11. А. М. Шутый, ЖЭТФ **137**, 277 (2010).