

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Иванов Алексей Владимирович

МАГНИТНЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ.
ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Курсовая работа

Научный руководитель:
Д. ф - м. н.,
профессор
В. М. Уздин

Санкт-Петербург
2013

1 Введение.

Во всех устройствах, использующие магнитные наноструктуры, имеют место переходы между магнитными состояниями. Эти переходы, как правило, можно стимулировать управляющим внешним магнитным полем. Однако, при конечной температуре, в системе на наномасштабе возможны случайные переходы между устойчивыми состояниями.

Устойчивым магнитным состояниям соответствует локальный минимум энергии. Обычно переход между магнитными состояниями, даже для наносистем, представляет собой редкое явление на масштабе осцилляций отдельных магнитных моментов. Времена жизни магнитных состояний определяются седловыми точками на энергетической поверхности как функции параметров, задающих магнитное состояние системы. Динамическое моделирование в случае большого числа магнитных степеней свободы не представляется возможным. Однако, если число параметров, задающих магнитную конфигурацию невелико, динамический расчет может быть проведен, что позволяет контролировать точность других приближенных методов. Ниже будет представлен простейший пример расчета динамики магнитной системы при учете случайных воздействий, обусловленных тепловыми флуктуациями.

2 Модель и численный расчёт.

2.1 Уравнение Ландау-Лифшица.

Динамика магнитного момента описывается уравнением Ландау-Лифшица

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{V}] - \gamma \frac{\alpha}{M} [\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{V}]] \quad (1)$$

Первое слагаемое отвечает за вращение магнитного момента относительно оси, задаваемой полем \mathbf{V} , второе - за диссипацию энергии, α - коэффициент затухания, γ - гиромагнитное отношение.

Из уравнения (1) следует, что величина магнитного момента сохранится, поэтому достаточно задать только две компоненты вектора \mathbf{M} .

При нулевой температуре и при коэффициенте затухания отличном от нуля магнитный момент с течением времени упорядочивается вдоль поля \mathbf{V} . При коэффициенте затухания равном нулю энергия системы сохраняется, и магнитный момент совершает свободное вращение относительно оси, задаваемой полем \mathbf{V} (Рис. 1).

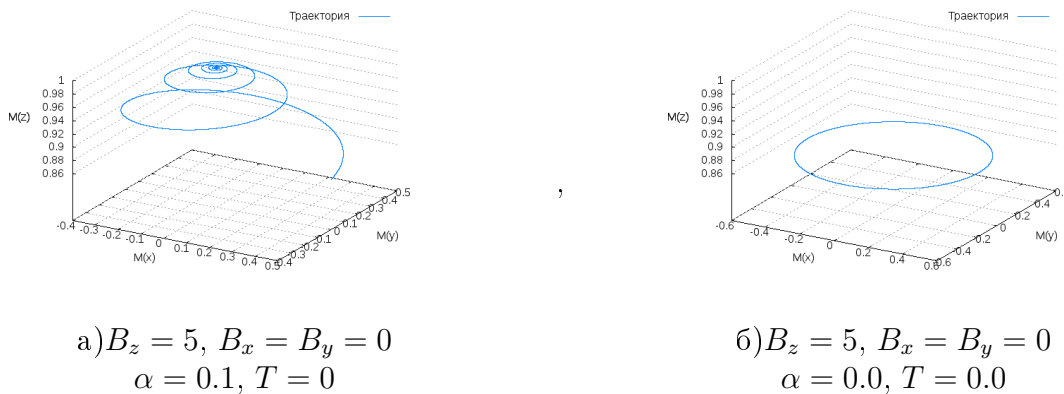


Figure 1: Движение магнитного момента в постоянном поле

Для того чтобы учесть взаимодействие с термостатом, по аналогии с броуновским движением, к полю \mathbf{V} добавляется случайное поле \mathbf{R} . В простейшем случае δ -коррелированного

процесса коррелятор случайных полей задается выражением [1] :

$$\langle \mathbf{R}_k(t_i)\mathbf{R}_l(t_j) \rangle = 2 \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \frac{k_b T}{\gamma M} \delta_{kl} \delta(t_i - t_j)$$

За нулевой уровень энергии принимается энергия магнитного момента при нулевой температуре, тогда энергия в любой момент времени :

$$E = |\mathbf{M}||\mathbf{B}| - (\mathbf{M}, \mathbf{B})$$

В этом случае, в системе за конечное время (время релаксации) устанавливается распределение Больцмана (Рис. 2) и при этом :

$$\langle E \rangle = k_b T$$

От коэффициента затухания зависит скорость выхода энергии на плато (Рис. 2 и 3). Чем больше коэффициент трения, тем быстрее система приходит в равновесие.

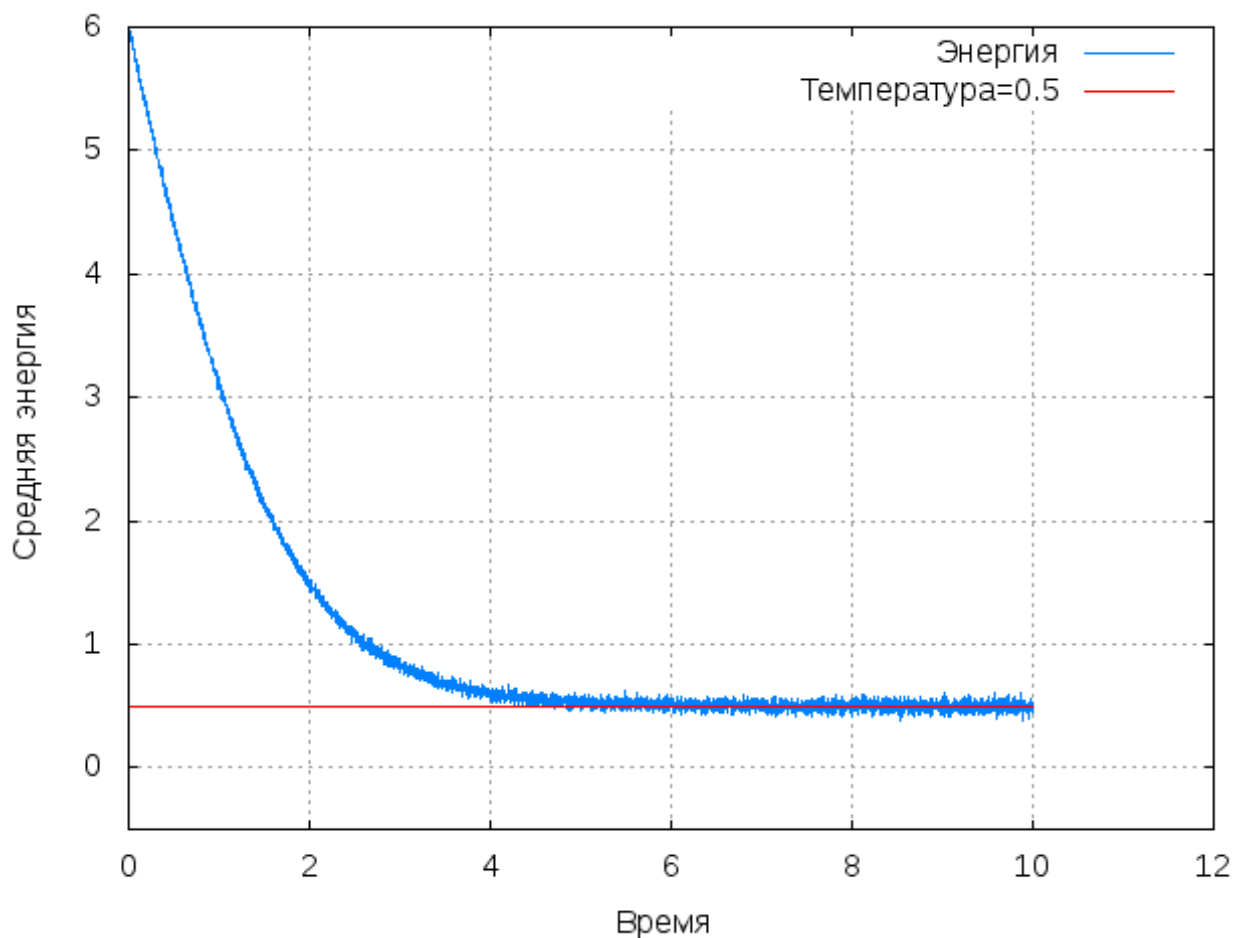


Figure 2:

Средняя энергия магнитного момента при температуре $T = 0.5$ и постоянном поле $B = 6$.
Коэффициент затухания $\alpha = 0.1$.

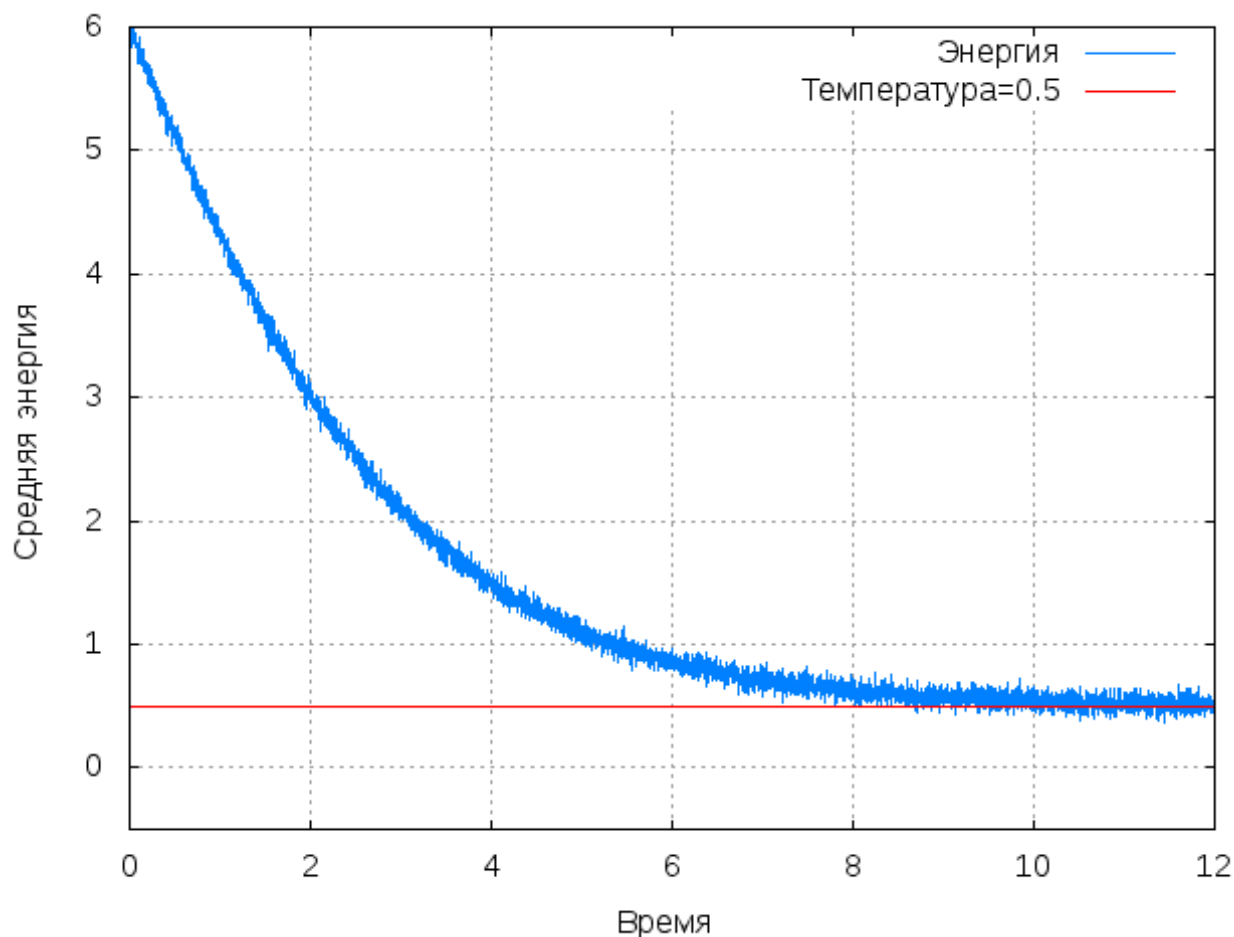


Figure 3:

Средняя энергия магнитного момента при температуре $T = 0.5$ и постоянном поле $B = 6$.
Коэффициент затухания $\alpha = 0.05$.

2.2 Магнитные переходы.

Для описания магнитного момента в поле анизотропии, к энергии системы добавляется выражение:

$$E_a = k(\mathbf{M}, \mathbf{e})^2$$

где \mathbf{e} -вектор, а k -коэффициент анизотропии. При $k > 0$ получаем так называемую анизотропию "легкая плоскость", т.к. магнитному моменту энергетически выгодно быть направленным в плоскости, перпендикулярной \mathbf{e} (Рис. 4). При $k < 0$ минимум энергии достигается, когда момент направлен вдоль вектора \mathbf{e} - анизотропия "легкая ось" (Рис. 5).

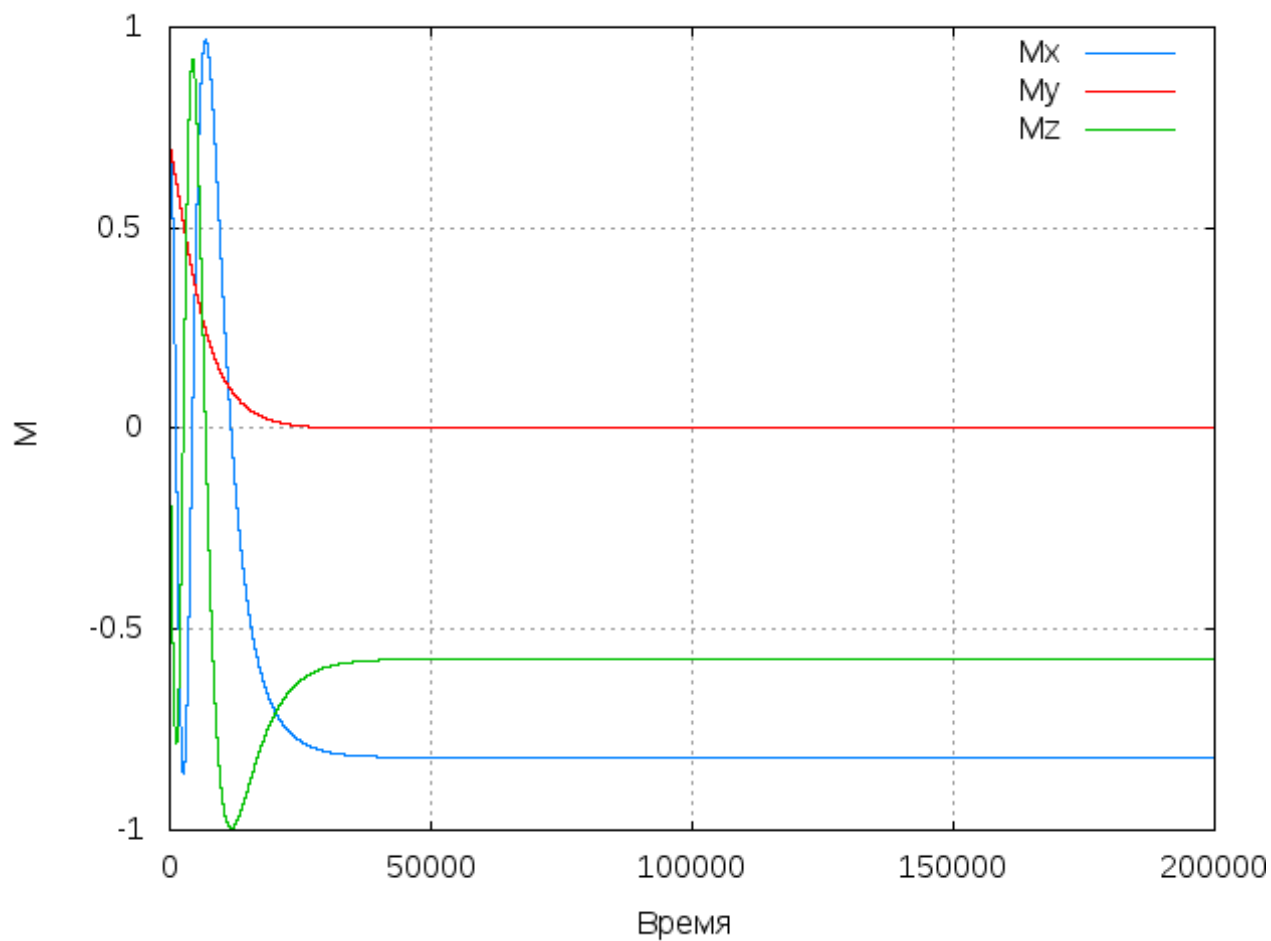


Figure 4:
 Проекции магнитного момента в случае анизотропии "легкая плоскость".
 Вектор \mathbf{e} направлен вдоль оси y .
 Температура $T = 0$, $k = 2$, $\alpha = 0.1$.

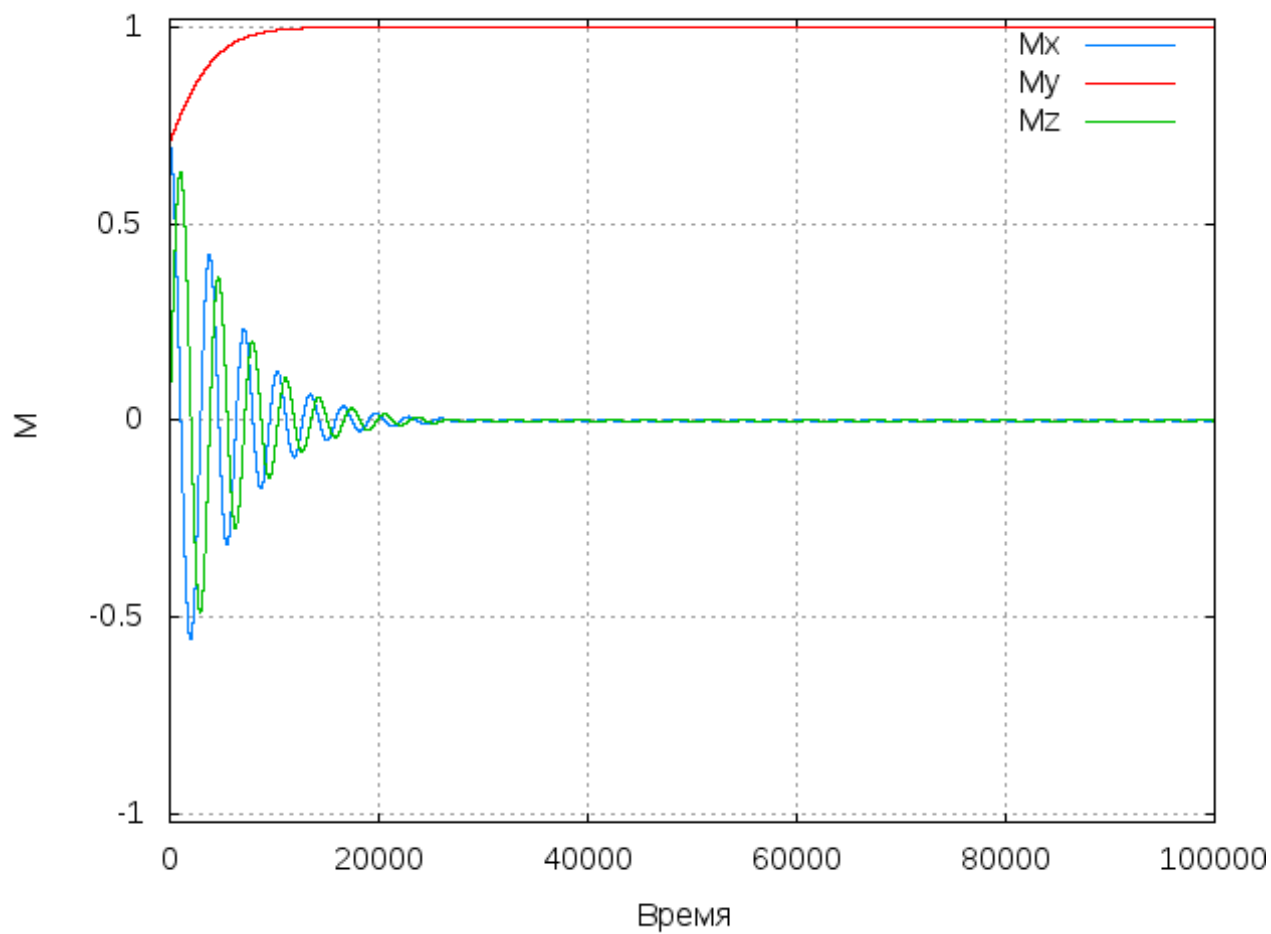


Figure 5:
 Проекции магнитного момента в случае анизотропии "легкая ось". Ось анизотропии – ось y .
 Температура $T = 0$, $k = -2$, $\alpha = 0.1$.

Рассмотрим случай, когда имеется как анизотропия "легкая плоскость", так и "легкая ось":

$$E_a = k_1(\mathbf{M}, \mathbf{e}_1)^2 + k_2(\mathbf{M}, \mathbf{e}_2)^2 \quad (2)$$

$$k_1 < 0$$

$$k_2 > 0$$

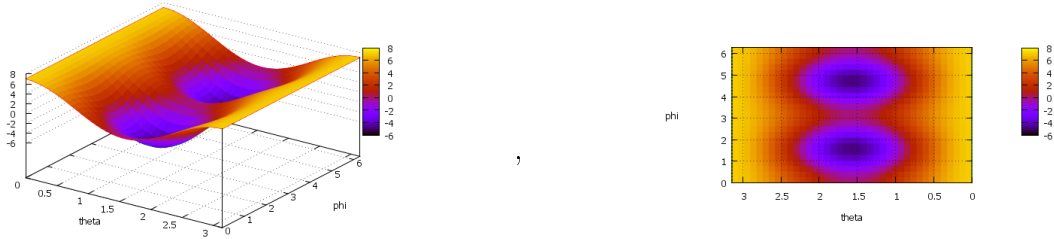
Пусть магнитный момент задан координатных осях x, y, z . Направим вектор \mathbf{e}_1 вдоль оси y , а вектор \mathbf{e}_2 вдоль оси z :

$$E_a = k_1 M_y^2 + k_2 M_z^2$$

В полярных координатах:

$$E_a = k_1 M^2 \sin^2(\theta) \sin^2(\phi) + k_2 M^2 \cos^2(\theta)$$

Тогда энергия имеет две седловые точки и два минимума (Рис. 6), и система может находиться в двух устойчивых состояниях. При конечной температуре система совершает переходы между этими состояниями (Рис. 7). Величина потенциальной яма равна разности энергии в седловой точке и в точке минимума.



а) Энергия от фазовых переменных

б) Линии уровня

Figure 6: Энергетическая поверхность. $k_1 = -5, k_2 = 7$

Эффективное поле \mathbf{V} определяется выражением:

$$\mathbf{V} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}} = -2k_1(\mathbf{e}_1, \mathbf{M})\mathbf{e}_1 - 2k_2(\mathbf{e}_2, \mathbf{M})\mathbf{e}_2$$

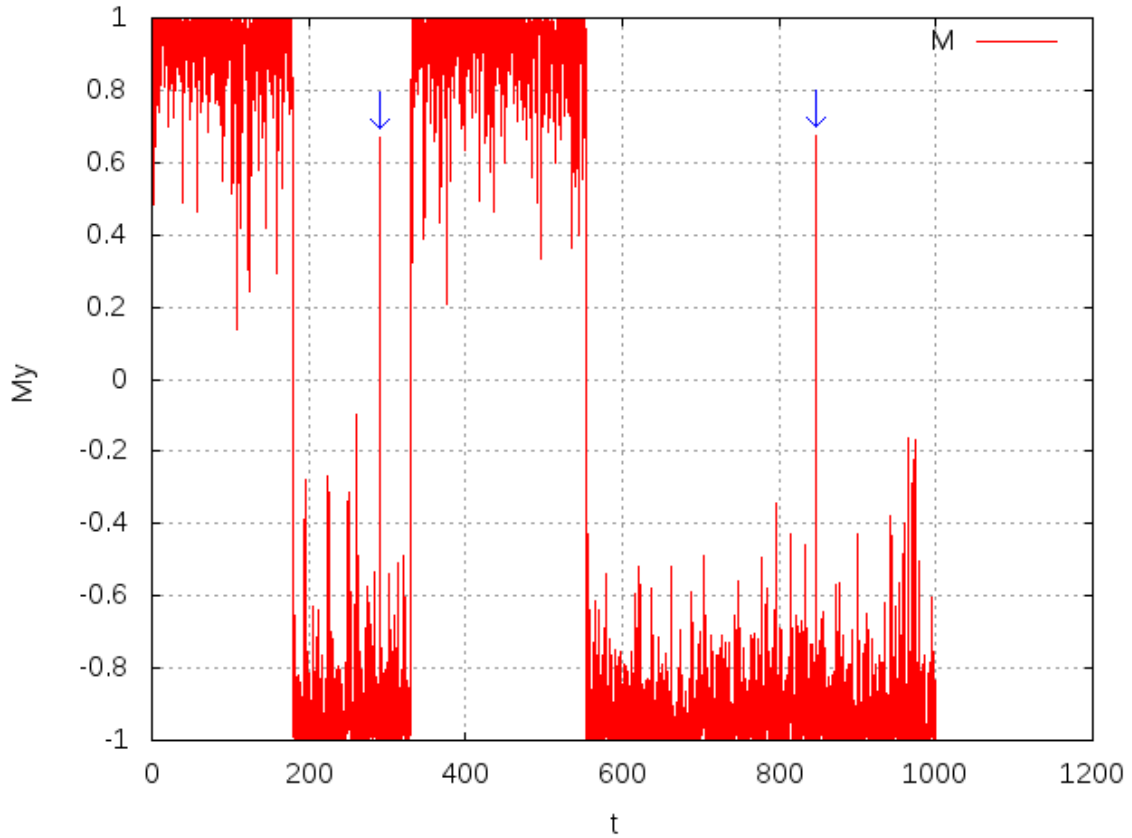


Figure 7: Динамика проекции магнитного момента на легкую ось анизотропии. Синей стрелкой указаны ложные переходы. $T = 0.82, k_1 = -5, k_2 = 7$

Нас будет интересовать зависимость числа переходов в единицу времени (константа скорости) от температуры. В физической химии константа скорости химической реакции удовлетворяет закону Аррениуса:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_b}{k_\beta T}\right) \quad (3)$$

В рамках теории переходного состояния (далее ТПС) можно показать, что закон Аррениуса справедлив и для магнитных переходов [2]. При этом фазовое пространство разделяется на две части, причем разделяющая поверхность проводится через седловую точку таким образом, чтобы любая траектория в фазовом пространстве при переходе из одного состояния в другое пересекала её. В ТПС предполагается, что если траектория прошла через разделяющую поверхность, то переход произошёл, т.е. не учитывается многократное пересечение разделяющей поверхности. В простейшем случае, когда энергия имеет вид (2), в рамках ТПС величина E_b равна величине потенциальной ямы. Численным моделированием уравнения Ландау-Лифшеца рассчитана константа скорости в зависимости от температуры с учетом многократного пересечения разделяющей поверхности.

Пример для конкретных параметров k_1, k_2 Введем переменные :

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{M}}{M}$$

$$\mathbf{b} = \gamma \mathbf{B}$$

Тогда уравнение (1) переписется в виде :

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = [\mathbf{m} \times (\mathbf{b} + \mathbf{r})] - \frac{\alpha}{m} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times (\mathbf{b} + \mathbf{r})]] \quad (4)$$

Где r -случайная сила распределенная по Гауссу такая, что:

$$\langle r_i r_j \rangle = 2 \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} T \delta(t_i - t_j)$$

$$T \equiv \frac{\gamma k_b T}{M}$$

Выражение для энергии:

$$E = k_1 \gamma M (\mathbf{m}, \mathbf{e})^2 + k_2 \gamma M (\mathbf{m}, \mathbf{e})^2$$

$$E = k_1 (\mathbf{m}, \mathbf{e})^2 + k_2 (\mathbf{m}, \mathbf{e})^2$$

$$k_1 < 0$$

$$k_2 > 0$$

$$k_{1,2} \equiv k_{1,2} \gamma M$$

Отметим, что теперь размерность температуры, энергии, коэффициента анизотропии и поля есть 1/время.

Установим параметры $k_1 = 5$, $k_2 = -7$, $\alpha = 0.1$, $m = 1$. Динамика проекции магнитного момента на ось анизотропии (ось y) указана на рисунке 7. Т.к. m_y изменяется от -1 до 1 , то разобьём ось y на 3 интервала:

$$A(y, eps) : -1.0 \leq y < -1.0 + eps$$

$$B(y, eps) : -1.0 + eps \leq y < 1.0 - eps$$

$$D(y, eps) : 1.0 - eps < y \leq 1.0$$

Будем следить за появлением проекции магнитного момента в интервалах А и В. Пусть интервалу А соответствует 1, а В-0. Тогда получим последовательность из нулей и единиц. Если в последовательности встречаются 11 или 00, то перехода не было. Если 10 или 01, то переход был.

Рассмотрим интервал температуры такой, что отношение k_1 к T изменяется от 10 до 6. Построим зависимость логарифма числа переходов в единицу времени от температуры при разных значениях eps (Рис. 8 – 14). Аппроксимация данных проводилась в программе gnuplot функцией вида :

$$y = ax + b$$

Table 1: Результаты аппроксимации

eps	a	b
0.06	$-4.46969 \pm 0.06379(1.43\%)$	$0.28175 \pm 0.08952(31.77\%)$
0.20	$-4.62711 \pm 0.05783(1.25\%)$	$0.61459 \pm 0.08114(13.20\%)$
0.60	$-4.96548 \pm 0.04443(0.89\%)$	$1.44882 \pm 0.06234(4.30\%)$
0.90	$-5.01350 \pm 0.04665(0.93\%)$	$1.55106 \pm 0.0654(4.22\%)$
0.95	$-5.03896 \pm 0.05796(1.15\%)$	$1.68023 \pm 0.08134(4.84\%)$
0.98	$-5.11160 \pm 0.08052(1.58\%)$	$2.00345 \pm 0.11300(5.64\%)$

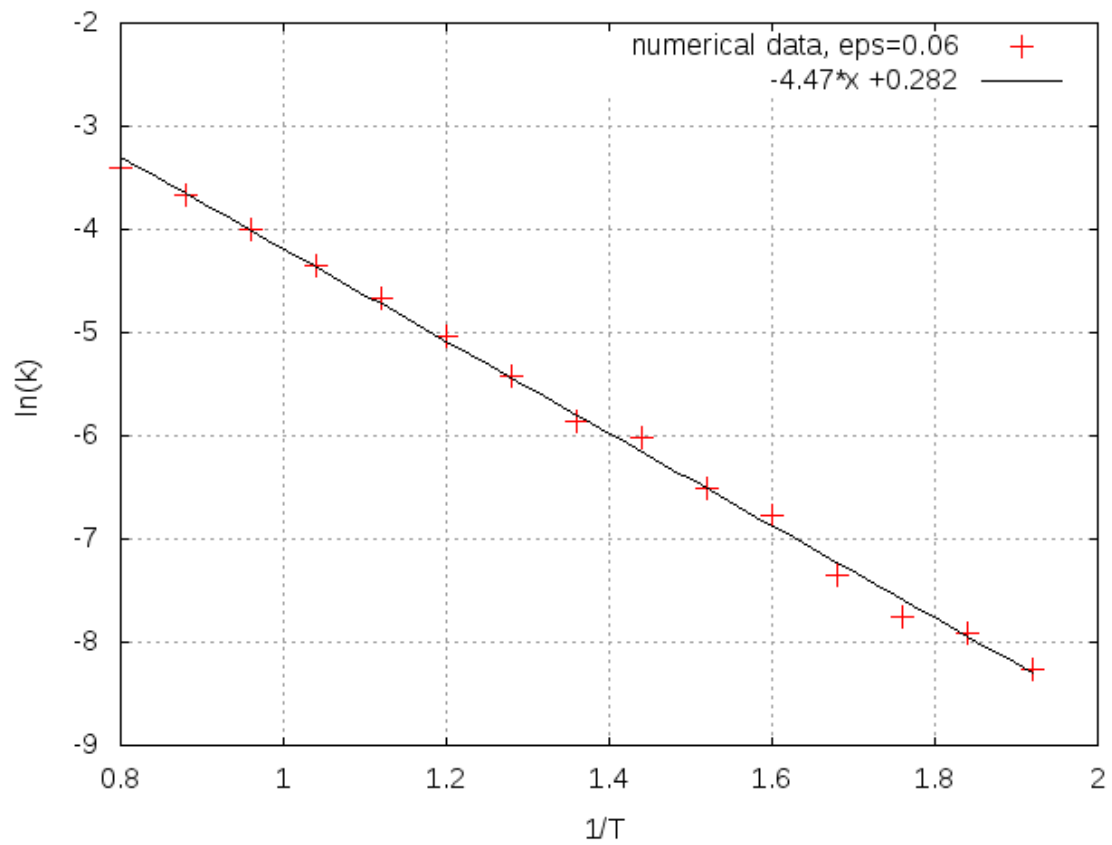


Figure 8: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.06$

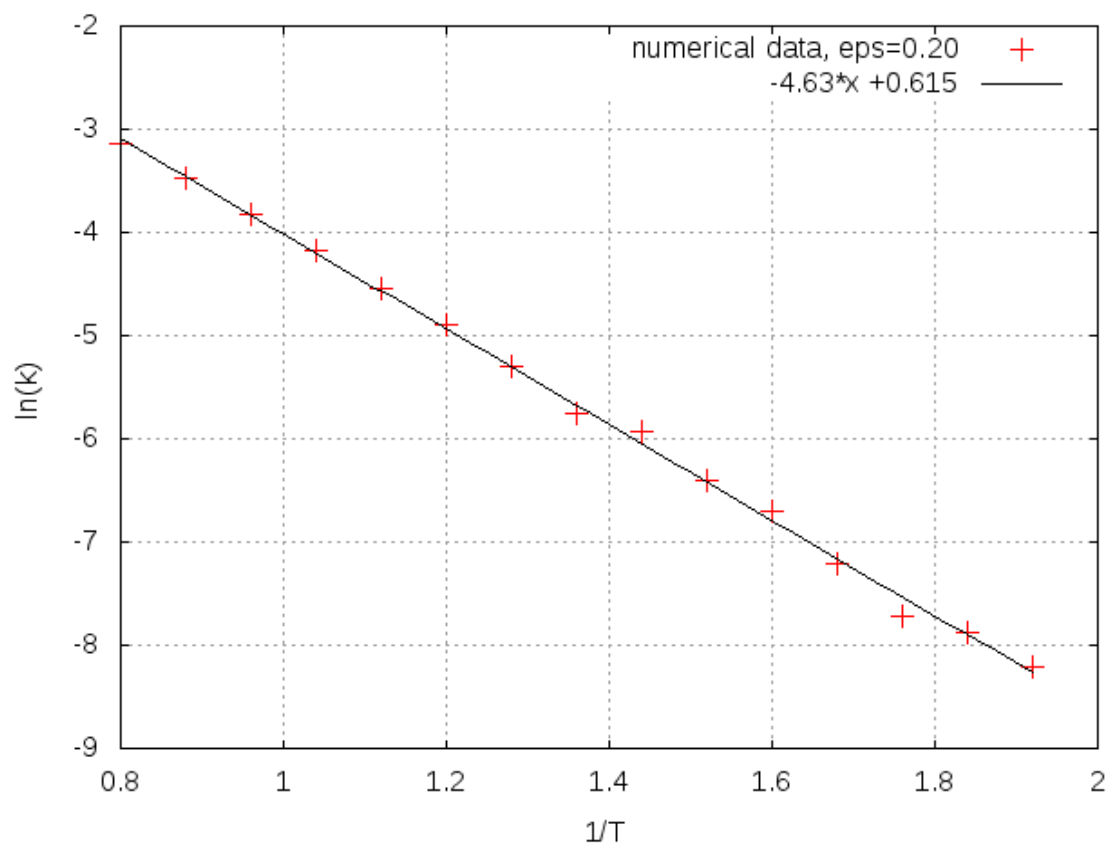


Figure 9: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.20$

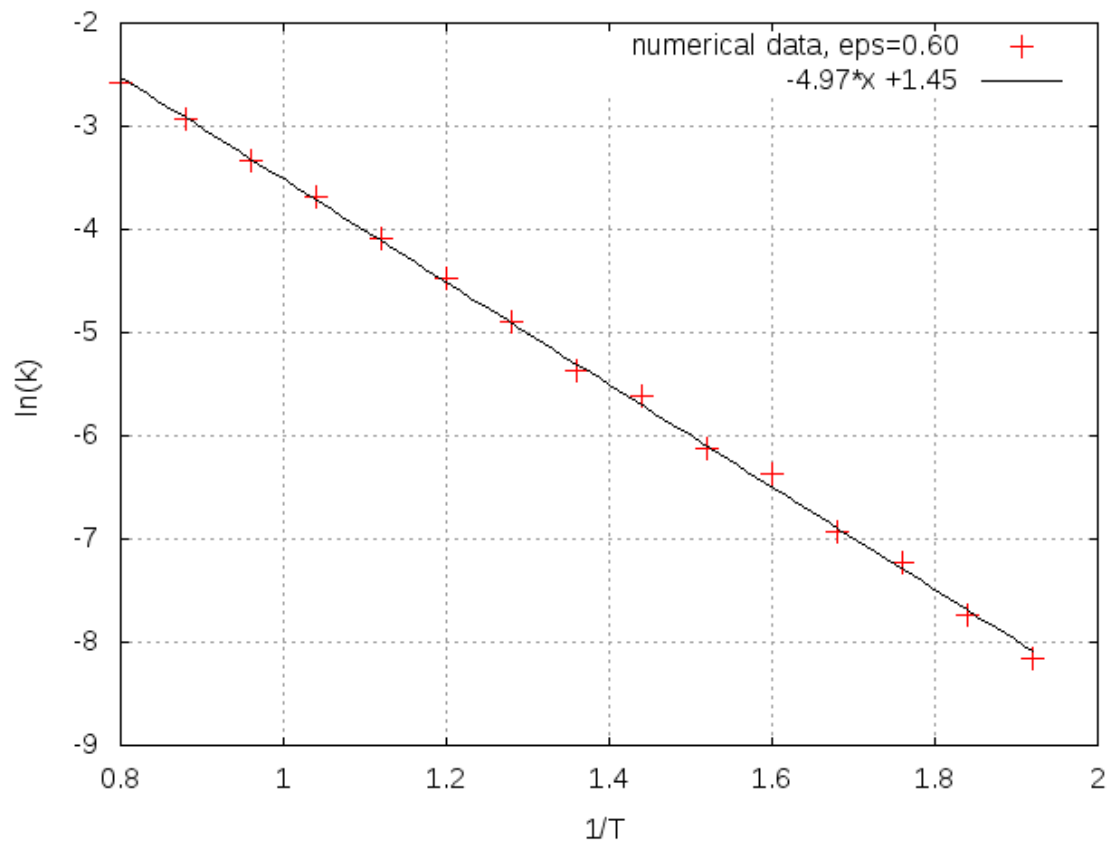


Figure 10: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.60$

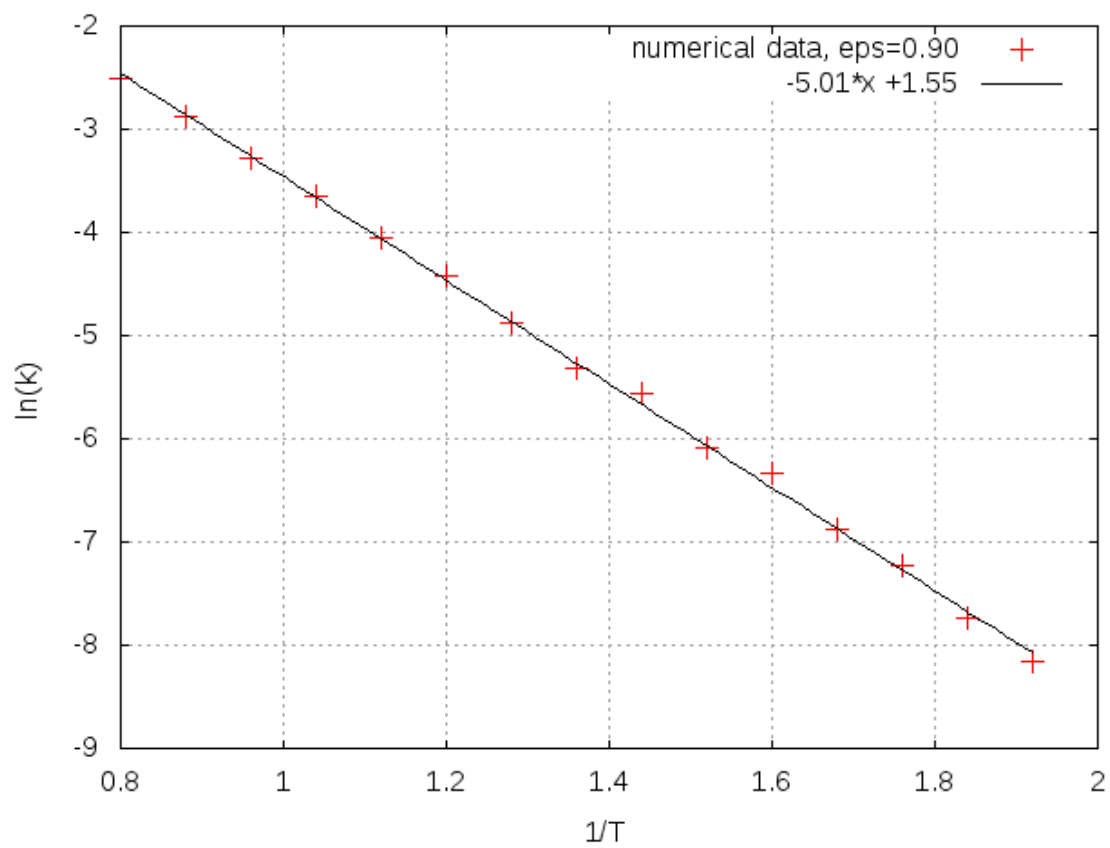


Figure 11: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.90$

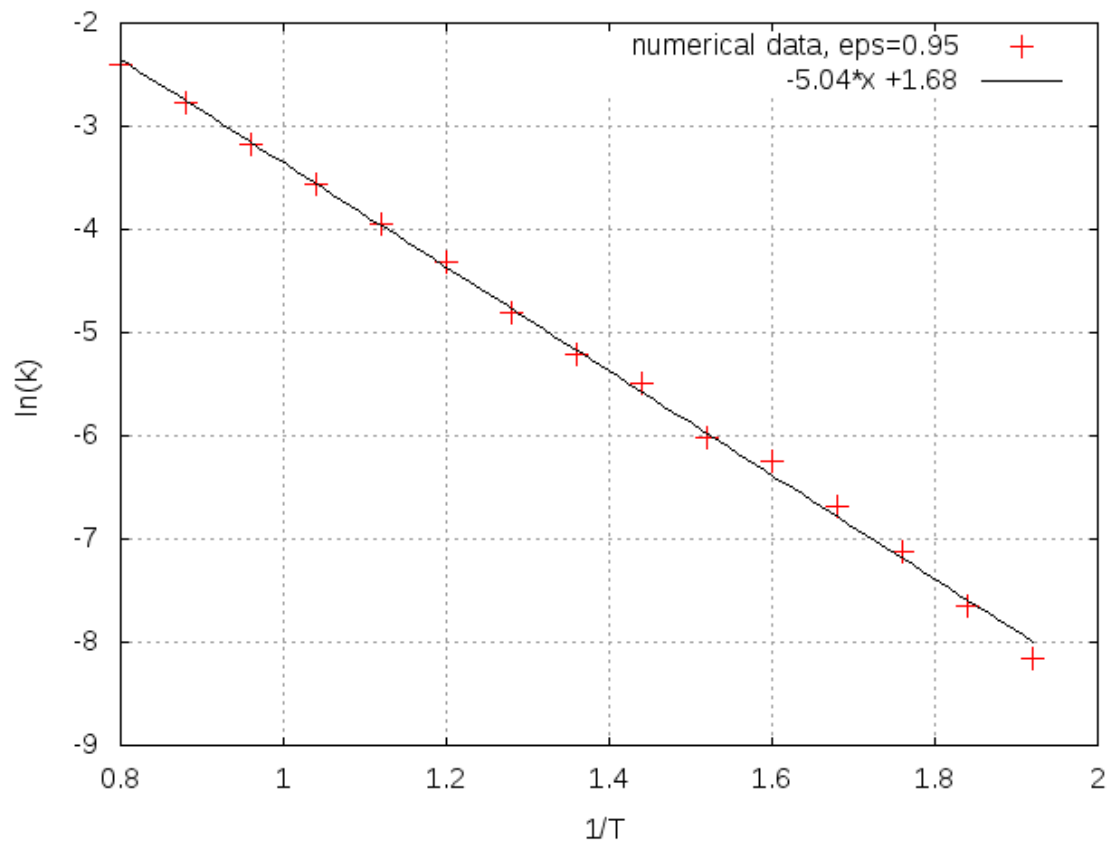


Figure 12: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.95$

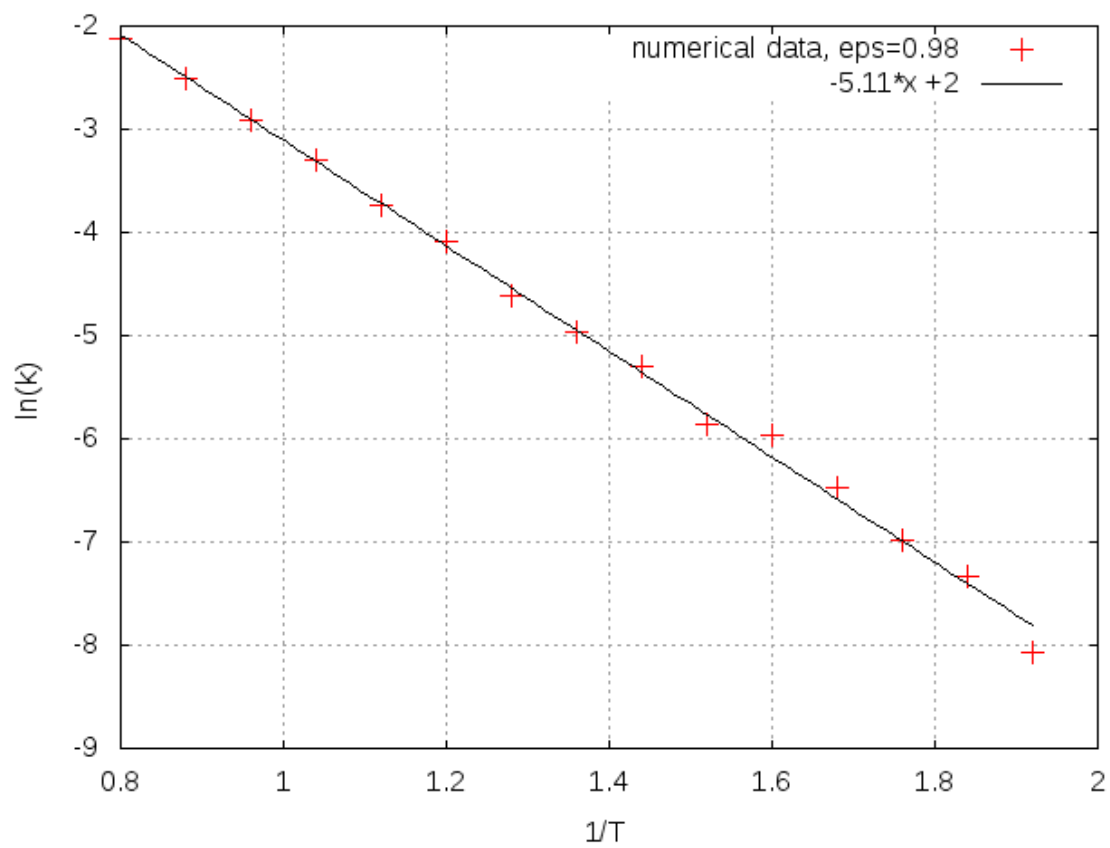


Figure 13: Результаты аппроксимации при $\text{eps} = 0.98$

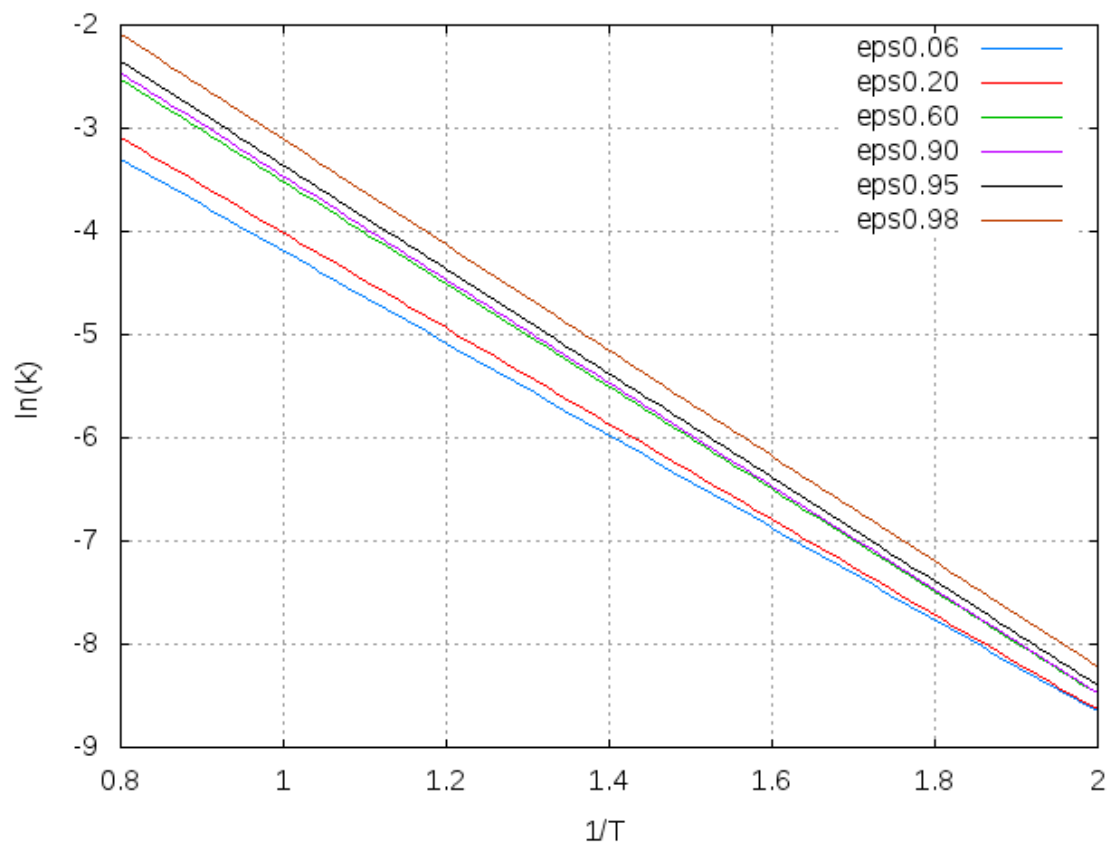


Figure 14: Результаты аппроксимации при разных значениях ϵ

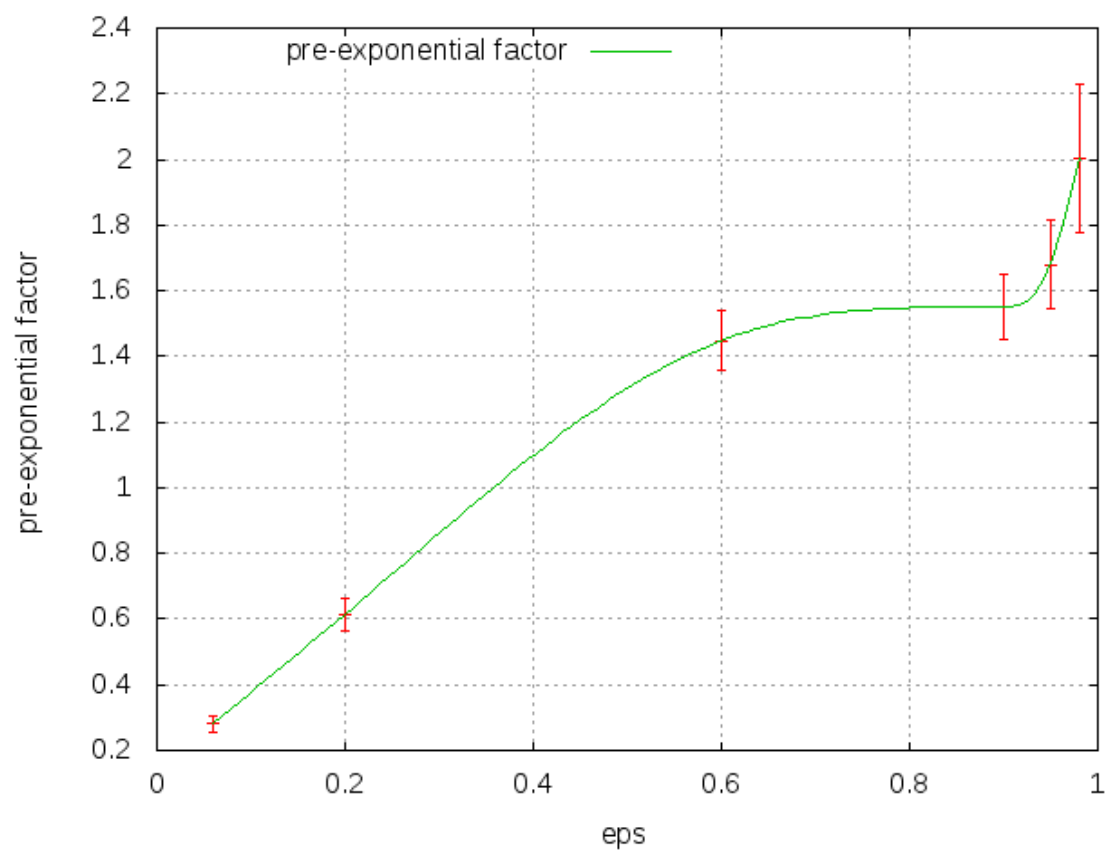


Figure 15: Зависимость предэкспоненциального множителя от ϵ

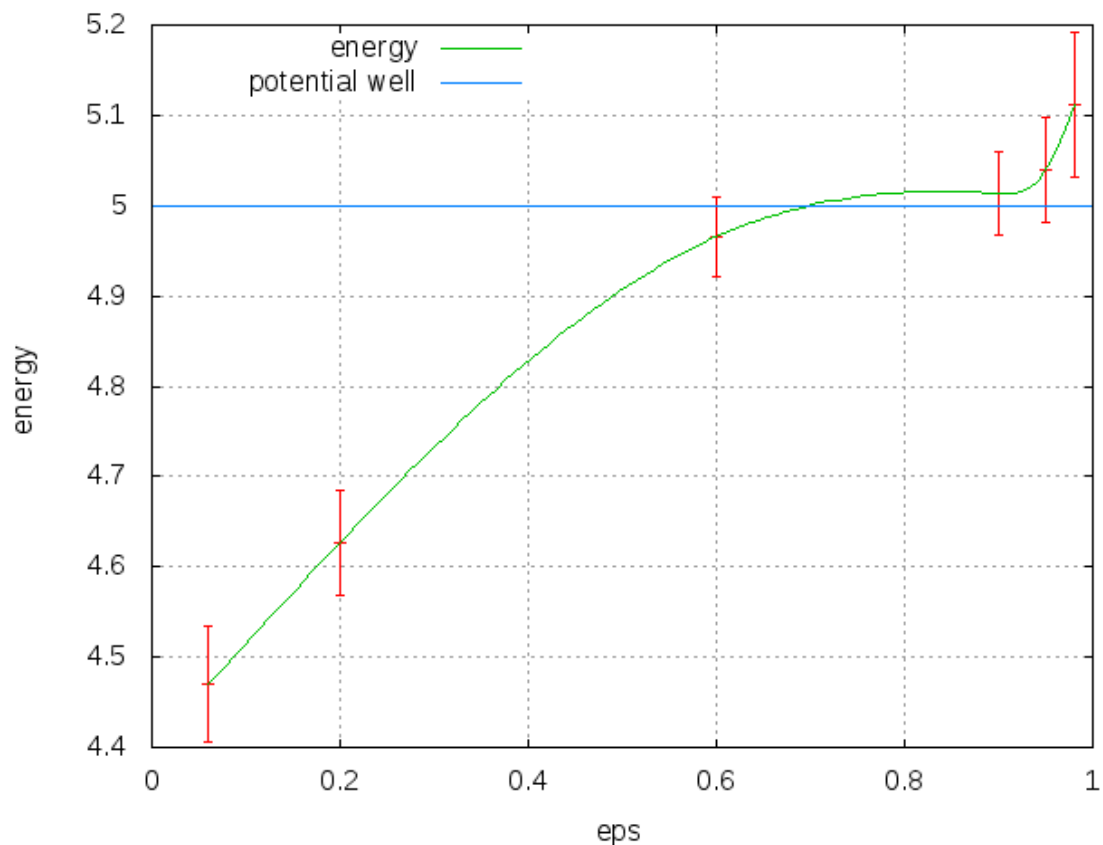


Figure 16: Зависимость энергии от eps

Ясно, что при $eps \rightarrow 1$ получаем приближение ТПС. Как видно, при $eps = 0.98$ абсолютное значение коэффициент $|a| \equiv E = (5.11 \pm 0.08)$, а величина энергетического барьера $E_b = 5.00 \Rightarrow 100 \cdot (E - E_b) / E_b = 2.2\%$. ТПС даёт завышенную оценку для константы скорости. Если не учитывать многократные пересечения разделяющей поверхности, то по-прежнему будет справедлив закон Аррениуса, но предэкспоненциальный множитель и величина E_b будут меньше, чем в теории переходного состояния (Рис. 15–16).

References

- [1] B Skubic, J Hellsvik, L Nordstrom and O Eriksson. Journal of physics: condensed matter 20 (2008) 315203
- [2] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Harmonic transition state theory of thermal spin transitions, Physical Review B 85, 184409 (2012).