

استخراج نمودارهای فازی نانوفیلمهای نازک ناهمسانگرد آیزینگ با

سطوح رقیق شده با استفاده از اتوماتای سلولی

مجيد مطلبيان و مهرداد قائمي *

دانشکده شیمی، دانشگاه خوارزمی، تهران، ایران

واژگان کلیدی : نقطه بازگشتی، نمودارهای فازی، فیلمهای نازک مغناطیسی، مدل اًیزینگ، اتوماتای سلولی، مغناطش، شبیهسازی

*ghaemi@khu.ac.ir فیلمهای نازک مغناطیسی با استفاده از نظریه میدان موثر (^۲TFT) توسط کانیوشی مورد مطالعه قرار گرفتند [۳و۴]. به نظر میرسد که نتایج EFT از دقت بالاتری نسبت به نتایج MFT برخوردار هستند[۵]. مدل آیزینگ لایهای به عنوان مدلی ساده برای فیلم فوق نازک مدل آیزینگ لایهای به عنوان مدلی ساده برای فیلم فوق نازک مغناطیسی مورد استفاده قرار میگیرد. این فیلمها دارای کاربردی مغناطیسی مورد استفاده قرار میگیرد. این فیلمها دارای کاربردی آلایش دم یوشش دهی تازک با پوشش دهی افزایش دمای کوری میشود که در لوحهای نوری مغناطیسی کاربرد دارد. فیلمهای کبالت پوشش داده شده بر روی کریستال کاربرد دارد. فیلمهای کبالت پوشش داده شده بر روی کریستال مدلهای آیزینگ لایهای هستند[۶].

لایهای از W(1 1 0) به گونهای که اتمهای لایه سطح با

۱– مقدمه

در سال ۱۹۲۵، ارنست آیزینگ مدل یک بعدی را برای توصیف رفتارهای مواد فرومغناطیس ارائه کرد[۱]. پس از نوزده سال، لارس انزاگر مدل آیزینگ را برای دوبعد در غیاب میدانهای خارجی به صورت تحلیلی حل کرد[۲]. حل تحلیلی مدل آیزینگ در سه بعد کماکان به صورت یک مسئله حل نشده باقی مانده و در حال حاضر تلاشها، بر روشهای حل عددی و روشهای تقریبی متمرکز شدهاند. مقایسه نتایج حاصل از حل تحلیلی با نتایج حاصل از نظریه میدان میانگین ('MFT) نشان میدهد که TFT نمیتواند نتایج کمی صحیحی از نقطه بحرانی ارائه کند. با تمام این توضیحات، در مدلهای متفاوت آیزینگ از MFT زینگ از میدان میاوت آیزینگ از محل

Mean field theory
 Effective field theory
 تاریخ دریافت:۱۴۰۰/۰۴/۱۷
 تاریخ پذیرش:۱۴۰۰/۰۴/۱۷

شماره ٣| سال هشتم | پاييز ١۴٠٠

اتمهای توده ی لایه زیرین به طور آنتی فرومغناطیس جفت شده اند سنتز کرد، همچنین، افزون بر فیلمهای Gd می توان از Tb نیز استفاده کرد که بسیار به هم شباهت دارند [۷]. افزون بر این، La_{0.67}Ca_{0.33}MnO₃ (LCMN) دLa_{0.67}Ca_{0.33}MnO می توان ذرات نانو فرومغناطیس (LCMN) پوسته – هسته را به وسیله مدل پوسته – هسته با یک جفت شدگی پوسته – هسته منفی توصیف کرد [۸].

هدف ما در این مطالعه، استخراج نمودارهای فازی برای مدل سه لایهای بدون میدان خارجی با استفاده از اتوماتای سلولی (^۱ CA) و مقایسه نتایج با EFT است. روش CA، نوعی شبیهسازی است که به نظر میرسد انتخاب خوبی برای محاسبه نقاط بحرانی در شرایط متفاوت است. در CA بر خلاف روش مونت کارلو تمام سلولها به طور همزمان بهروز میشود. در بررسیهای اخیر، نشان داده شده است که میتوان با استفاده از CA نقاط بحرانی را برای مدلهای آیزینگ دو لایه و پاتس به دست بیاوریم و با استفاده از CA احتمالات وارونگی اسپین ها بر پایه الگوریتم گلوبر [۱۲] به دست میآیند. در انتها، مقایسه نتایج حاصل از شبیهسازی با EFT مورد بحث قرار گرفته است.

۲- مدل و فرمولاسیون

مدل ما یک شبکه مربعی سه لایهای است، که از شرایطِ مرزیِ دورهای پیروی می کند. در هر لایه این شبکه، *I* سطر و *D* ستون داریم. بنابراین، تعداد سایتهای هر لایه $b \times I$ است، که تمام لایهها به طور موازی بر روی هم قرار گرفتهاند. شبکه را به صورت ناهمسانگرد فرض کردیم که $I \neq J_s \neq J$ است، *I* و *J* صورت ناهمسانگرد فرض کردیم که ا $J \neq J_s \neq J$ است، *I* و *J* ، به ترتیب، ثابتهای جفتشدگی نزدیکترین همسایگان هر سایت در لایه درونی و لایه سطح هستند. *I* نیز ثابت جفت-شدگی سایت با سایت همسایه در لایه مجاور خود است، این ثابتها در شکل ۱ نشان داده شده است. برای هر سایت یک متغیر اسپین به صورت $(i,j)^n \pm (i,j)^n$ تعریف می کنیم، نشان دهنده شماره هر لایه است که میتواند مقداری از یک تا نشان دهنده شماره هر لایه است که میتواند مقداری از یک تا سه را اختیار کند. چون تنها دو سطح رقیق داریم بنابراین صفر است که به ترتیب به معنی اشغال سایتها با اتمهای

مغناطیسی(با احتمال q) و غیر مغناطیسی (با احتمال q-۱) است، در این شبیهسازی تمام سایتهای لایه میانی با اتمهای مغناطیسی اشغال شدهاند، بنابراین، **1** = (*i,j*)² است.





شکل ۱. (الف) نمایی سهبعدی از مدل آیزینگ سهلایهای با سطوح رقیق شده، در این شکل دایرههای خاکستری نشان دهنده سایتهای مغناطیسی و دایرههای سفید نشاندهنده سایتهای غیرمغناطیسی است. (ب) نمایی مقطعی از مدل آیزینگ سهلایهای با سطوح رقیق شده، در این شکل دایرههای خاکستری نشان دهنده سایتهای مغناطیسی و دایرههای سفید نشاندهنده سایتهای غیرمغناطیسی است. لایههای سطح با شماره (۱) و (۳) و لایه میانی با شماره (۲) مشخص شده است.

در الگوریتم گلوبر [۱۲] برای به روزرسانی سایتهای مغناطیسی از روش خانه شطرنجی استفاده کردیم [۶]. در این شبیهسازی لایههای سطح مانند یک دیگر شطرنجی شدند، این در حالی است که لایه میانی مخالف آنها شطرنجی شده است. بهروز شدن سایتها بر اساس قوانین احتمال است، به این صورت که ابتدا سایتهای سفید و سپس، سایتهای سیاه بهروز می شوند. احتمال ۱+ شدن سایت $\binom{p_{i,j}^{n+1}}{p_{i,j}}$ به صورت زیر محاسبه می شود:

$$p_{i,j}^{n,+} = \frac{e^{-\beta E_{i,j}^{n,+}}}{e^{-\beta E_{i,j}^{n,+}} + e^{-\beta E_{i,j}^{n,-}}}$$
(1)

 $E_{i,j}^{n,\pm}$ در اینجا، T انرژی پیکربندی هر سایت است که از روابط زیر به دست می آید:

نوایش سر¹ مطرنجی
$$I_{ij}^{1,\pm}$$
ستفاده میکنیم، و برای افزایش سر $\{\sigma^1(i+1,j) + \sigma^1(i,j+1) + \sigma^1(i-1,j) + \sigma^1(i,j-1)\}$ (۲) محاسبات برای هر لایه از یک شبکه دوبعدی ۵۰×۵۰ استف $-J_1\sigma^1(i,j)\sigma^2(i,j)$

$$\begin{split} E_{i,j}^{2,\pm} &= -J\sigma^2(i,j)\{\sigma^2(i+1,j) + \sigma^2(i,j+1) + \sigma^2(i-1,j) \\ &+ \sigma^2(i,j-1)\} - J_1\sigma^2(i,j)\{\sigma^1(i,j) + \sigma^3(i,j)\} \end{split}$$

$$\begin{split} E_{i,j}^{3,\pm} &= -J_s \sigma^3(i,j) \{ \sigma^3(i+1,j) + \sigma^3(i,j+1) \\ &+ \sigma^3(i-1,j) + \sigma^3(i,j-1) \} - J_1 \sigma^3(i,j) \sigma^2(i,j) \end{split}$$

(۴)

که در اینجا :

$$\sigma^{n}(i,j) = -1$$
 برای $E_{i,j}^{n,-}$
 $\sigma^{n}(i,j) = +1$ برای $E_{i,j}^{n,+}$ (۵)

بنابراین، با احتمال p^{n,+}_{i,j} ۱ اسپین سایتهای شبکه روبهپایین است. میانگین مغناطش شبکه برای این مدل را میتوان به صورت زیر تعریف کرد [۱۳]

$$\langle M \rangle = \langle \sum_{n} \sum_{j=1}^{d,*} \sum_{i=1}^{l,*} \sigma^n (i,j) \rangle \tag{7}$$

در اینجا * نشان دهنده شریط مرزی دورهای است. میانگین مغناطش در واحد اسپین را به صورت زیر تعریف میکنیم

$$\langle m \rangle = \frac{\langle M \rangle}{N}$$
 (Y)

در این رابطه تعداد تمام سایتها که برابر با $\mathbf{x} \times \mathbf{d} \times \mathbf{l}$ است با N نشان داده شده است، ما دو متغیر جدید نیز تعریف می کنیم N

$$r = \frac{J_4}{J} \tag{A}$$

$$J_s = J(1 + \Delta_s) \tag{9}$$

حالت آغازین در شبیه سازی این مدل به صورت ${}_{s} \Lambda$ ، ${}_{g} q$ ثابت است، همچنین، تمام سایت های مغناطیسی دارای حالت اسپین های بالا (۱+) هستند. برای افزایش دقت محاسبات از

(زرفنها خانه شطر بخی عستفاده می کنیم، و برای افزایش سرعت محاسبات برای هر لایه از یک شبکه دوبعدی ۵۰×۵۰ استفاده می کنیم. در هر گام زمانی برای محاسبه میانگین مغناطش هر سایت از روابط (۶) و (۷) در ۵۰ نمونه متفاوت استفاده می کنیم.

۳- نتایج و نمودارهای فازی

با رسم میانگین مغناطش هر سایت $\langle m \rangle$ در برابر زمان می توان دمای بحرانی کاهش یافته ($\frac{K_c}{I} = \frac{K_c}{J}$) را محاسبه کرد. همان-طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، هنگامی که CA با حالت آغازین همگن (در اصطلاح، تمام سایتهای مغناطیسی دارای حالت اسپینی بالا، یا ۲+ هستند)، پیش از نقاط بحرانی دارای حالت اسپینی بالا، یا ۲+ هستند)، پیش از نقاط بحرانی در K_c)، $\langle m \rangle$ در اطراف مقادیر غیرصفر افتوخیز دارد و با افزایش دمای کاهش یافته ($\frac{K}{I} = X$)، میانگین مغناطش در واحد اسپین کاهش خواهد یافت. در نقطه بحرانی مقدار $\langle m \rangle$ بسیار آهسته و با حداکثر زمان به سمت صفر می رود و در نهایت صفر می شود و شاهد بیش ترین افتوخیز حول مغناطش صفر خواهیم بود، حال شاهد بیش ترین افتوخیز حول مغناطش صفر خواهیم بود، حال آن که پس از نقطه بحرانی $\langle m \rangle$ به سرعت صفر می شود و حول آن افتوخیز می کند. به زمانی که مقدار $\langle m \rangle$ برای هر X به مقدار ثابتی می رسد زمان آسایش (τ) می گویند. به عبارت دیگر، این زمانی است که سیستم در تعادل حرارتی قرار گرفته است.



شکل ۲. نمودارهای تغییرات متوسط مغناطش در هر سایت(m) بر حسب زمان با تعداد نمونه ۵۰: در هر سه نمودار ۰/۰ r = ۰/۰ و $\Lambda = q$ ؛ همچنین در ۵) $\Lambda_{s} = 0$ و $\Lambda_{s} = r/1$ (r = 0) و $\kappa_{c} = K$

 $(K \ge K_C)K = \tau/\tau \Lambda$



 $\Delta_{\mathbf{s}}$ شکل ۴. نمودار تغییرات K_c بر حسب r برای حالت ۱ q=q ومقادیر متفاوت

r شکل ۵ نشاندهنده تغییرات Kc به عنوان تابعی از r در $(1, -q) = e^{-1}$ است. همان طور که مشاهده می شود K_c در $(1, -q) = e^{-1}$ است. همان طور که مشاهده می شود K_c در K_c با افزایش خطی پیدا می کند، که با افزایش K_c ثابت جفت شدگی بین لایه ها ما شاهد افزایش مقدار نقطه بحرانی K_c شستیم و در مقایسه با نتایج EFT [۵] که یک مقدار بیشینه K_c مستیم. و در مقایسه با نتایج TFT [۵] که یک مقدار بیشینه K_c در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r مینیم. در r مشخص پیش بینی میکند ما شاهد نتایج متفاوتی هستیم. در r می کردیم. برای این موقعیت مقدار K_c نقطه r برانی شروع به افزایش میکند که برابر با ۲/۲۵ است. در روش EFT بحرانی شروع به افزایش میکند که برابر با مارد r می کند که برابر با مارد r ورش الت. ورانی ناز افزایش به صورت خطی با افزایش r می کند که برابر با مارد r مقدار نظر عددی ما شاهد نیز ما شاهد رفتار یکسان هستیم البته از نظر عددی ما شاهد

تفاوت در دو روش هستيم [۵].



 Δ_s = ۰/۰ شکل ۵. نمودار فازی K_c بر حسب r برای حالت q = ۰/۱ شکل ۵. نمودار فازی مقدار



در ۲/۲۷ $K_c = K = 7/۲$ مشاهده می شود. τ

مقدار τ وابسته به نمودار <m> در برابر زمان است. از نمودار شکل π میتوان دید که قبل از نقطه بحرانی شاهد افزایش τ هستیم و در نقطه بحرانی، τ به حداکثر مقدار خود خواهد رسید، پس از نقطه بحرانی نیز τ به سرعت کاهش می-زیابد. در شکل π نمودار τ بر حسب تابعی از K در شرایط $\cdot/=p$ r=-1/ و $\cdot/ = {}_{s} \Delta$ رسم شده است. توجه کنید که در این شرایط مدل سه لایهای، به سه مدل آیزینگ دو بعدی مجزا شرایط مدل سه لایهای، به سه مدل آیزینگ دو بعدی مجزا تبدیل میشود. مقدار دمای کاهش یافته در نقطه بحرانی ۲/۲۷ تبدیل می شود. مقدار دمای کاهش یافته در نقطه بحرانی در حل تحلیلی است [۲] و نشان از صحت محاسبات دارد و با روش EFT که $K_{c} = 7/-9$ است [۵] دارای اختلاف است.

در شکل ۴ نقطه بحرانی به عنوان تابعی از r در ۱/۰ q= برای سه r_{s} میشود با صفر شدن r_{s} متفاوت رسم شده است. مشاهده می شود با صفر شدن Λ_{s} مقدار K_{c} (در موارد ۰/۰ $\leq s$)برابر با ۲/۲۷ می شود، و برای مقدار K_{c} هستیم.



 $q=ullet / \eta = ullet / h$ شکل ۶ نمودار $K_{
m c}$ بر حسب $\Delta_{
m s}$ برای حالت $V = M_{
m c}$

یکی از جالبترین پدیدهها در سیستمهای لایهای، جفت-شدگی آنتیفرومغناطیسی است ($\cdot \cdot > r > r$) در این موقعیت پیش از دمای بحرانی اسپینهای سطح جهتی مخالف نسبت به اسپینهای لایهی درونی دارند. در شکل ۲ تغییرات میانگین مغناطش هر سایت برای لایه درونی $\langle m_{in} \rangle$ و لایههای سطحی مغناطش هر سایت برای لایه درونی $\langle m_{in} \rangle$ و لایههای سطحی $\langle m_s \rangle$ به عنوان تابعی از K با مقادیر ثابت $\wedge -1 - r - r \cdot \cdot \cdot$ آغازین تمام اسپینها رو به بالا ((1+) آغاز کردیم و پس از اینکه سیستم به حالت تعادل رسید، مقادیر میانگین $\langle m_i \rangle > e < m_s$ محاسبه شدند که به ترتیب مقادیر مثبت و منفی می گیرند.



 $q = \frac{1}{2} \left(m_{s} \right) \left(m_{s} \right)$ بر حسب K برای حالت $m_{s} \left(m_{s} \right) \left(m_{s} \right)$ شکل Y. نمودارهای $\left(m_{s} \right) \left(m_{s} \right) \left(n_{s} - \frac{1}{2} \right)$ $r = -\frac{1}{2} \left(n_{s} \right) \left(n_{s} \right) \left(n_{s} \right)$ (دایرههای سیاه) نشان دهنده میناطش Y یه مناطش Y یه میانی در واحد اسپین و $m_{s} \left(n_{s} \right)$ (دایرههای سیاه) نشان دهنده میانگین مغناطش Y یه میانی در واحد اسپین است.

شکل ۸، نشان دهنده تغییرات میانگین مغناطش هر سایت برای کل سیستم($\langle m \rangle$) نسبت به K برای شرایطی مشابه با شکل ۷ است. همان گونه که دیده میشود، در پیش از نقطه بحرانی ما شاهد برابر شدن $\langle m \rangle = (m_s - m_s)$ هستیم و مقدار $\langle m \rangle$ ما شاهد برابر شدن $\langle m \rangle = (m_s - m_s)$ مستیم و مقدار $\langle m \rangle$ برابر صفر میشود. این نقطه (۲/۵۶۴ = K) را نقطه جبران می نامیم[۵]. وجود نقطه جبران ارتباط قوی با پارامتر p دارد. همان - طور که در شکل ۸ مشاهده میشود، در مقدارهای یکسان r و کنیم.



 $\Delta_{s} = \cdot / \cdot = r = -1/20$ شکل ۸ نمودار (m) بر حسب K برای حالت ۱/۵۰ – r = r = r و با r = r و با به ترتیب با برای مقادیر متفاوت q (۵۲۵ ، ۱/۵۲۰ و ۱۳۵۰ که در شکل به ترتیب با دایره سیاه، دایره سیاه، دایره سیاه، دایره سیاه، دایره سیاه، نشان داده شدهاند.)

۴– نتیجه گیری

در این پژوهش، ما به بررسی ویژگی مغناطیسی فیلمهای آیزینگ سه لایهای در شبکهی مربعی با استفاده از شبیهسازی CA پرداختیم. از نقطه نظر کیفی، همان گونه که در شکلهای ۴، ۶، ۷ و ۸ مشاهده میشود نتایج ما قابل مقایسه با نظریه EFT است، اما مقدار نقطه بحرانی در این دو روش با یک دیگر متفاوت است [۵]. از دیدگاه کیفی تنها تفاوت افزایش خطی نمودار K_c بر مسب r است، حال آن که در نظریه EFT شاهد یک نقطه بیشینه هستیم [۵]. یکی از نتایج جالب در شبیهسازی حالت جفت شدگی آنتیفرومغناطیس بین لایهای (r < r > r) است. در شکل ۸ با

nanoparticle," J. Magn. Magn. Mater. 323, 311-315, 2011.

[9] Y. Asgari, M. Ghaemi, "Obtaining critical point and shift exponent for the anisotropic two-layer Ising and Potts models: Cellular automata approach," Physica. A. 387, 1937-1946, 2008.

[10] Y. Asgari, M. Ghaemi, M. G. Mahjani, "Calculation of the critical point for two-layer Ising and Potts models using Cellular Automata," Lect. Notes. Comput. Sc. 3305, 709-718, 2004.

[11] M. Ghaemi, S. Ahmadi, "Calculation of critical properties for the anisotropic two-layer Ising model on the Kagome lattice: Cellular automata approach," Physica. A. 391, 2007-2013, 2012.

[12] R. J. Glauber, "Time-dependent statistics of the Ising model," J. Math. Phys. 4, 294-307, 1963.

[13] M. E. Newman, G. T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics," first ed., Oxford University Press, New York, 2001. نمودار شکل ۳ با شرایط ۱/۰ $q = n \cdot \cdot \cdot q = e \cdot / \cdot = e$ و $- / \cdot = e$ ما شاهد سه شبکه مجزای آیزینگ دوبعدی خواهیم بود که نقطه بحرانی محاسبه شده برای آن (۲/۲ = ۲/۲۷) برابر با نقطه بحرانی محاسبه شده در حل تحلیلی است [۲] و به نظر می رسد که روش محاسبه شده در ما تحلیلی است [۲] و به نظر می می مناطیس محاسبه در مقیاس نانو باشد.

مراجع

[1] E. Ising, "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus," Z. Phys. 31, 253-258, 1925.

[2] L. Onsager, Crystal Statistics. I. "A two dimensional model with an order-disorder transition," Phys. Rev. 65, 117-149, 1944.

[3] R. Honmura, T. Kaneyoshi, "Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model," J. Phys. C. Solid. State. 12, 3979-3992, 1979.

[4] T. Kaneyoshi, "Differential operator technique in the Ising spin systems," Acta. Phys. Pol. A. 83, 703-737, 1993.

[5] T. Kaneyoshi, "Phase diagrams in nanoscaled Ising thin films with diluted surfaces; effects of interlayer coupling at the surfaces," Physica. B. 408, 126-133, 2013.

[6] M. Ghaemi, "Cellular Automata simulation of two-layer Ising and Potts models, in: A. Salcido (Eds.), Cellular Automata-Simplicity Behind Complexity," InTech Publisher, India, pp. 439-456, 2011.

[7] T. Kaneyoshi, "Introduction to Surface Magnetism," CRC Press, USA, 1991.

[8] R. N. Bhowmik, "Evidence of ferrimagnetism in ferromagnetic La0.67Ca0.33MnO3

Construction of phase diagrams in anisotropic nanoscaled Ising thin films with diluted surfaces using cellular automata approach

M.Motalebian, M.Ghaemi*

Faculty of Chemistry , Kharazmi University, Tehran, Iran

Abstract: The phase diagrams of the anisotropic three-layer Ising model on the square lattice with diluted surfaces have been constructed with high precision, using the probabilistic cellular automata with the Glauber algorithm. The thermal variation of magnetization is calculated for different values of nearest neighbor couplings: namely $J \neq J_s \neq J_l$, where J and J_s are the nearest neighbor couplings within inner-layer and surface-layer, respectively, and each magnetic site in the surface-layer is coupled with the nearest site in the inner-layer via the exchange interaction J_l . In the case of the antiferromagnetic coupling between layers, simulation results show existence of the compensation point in the phase diagram.

Keywords: Ising Model, Phase Diagrams, Thin films, Cellular Automata, magnetization, simulation.