

稀释 XY 自旋体系的计算机模拟^{*}

钟伟荣, 邵元智, 谭宇亮, 林光明

(中山大学物理学系, 广东 广州 510275)

摘要: 对自旋体系的平面 XY 模型进行了模拟计算, 研究了引入单轴各向异性项和随机各向异性项对体系各项性能的影响, 并得出了磁滞损耗 Area 与单轴各向异性常数 A 、随机各向异性常数 D 和随机各向异性所占比例 X 的指数标度关系为: $\text{Area} \sim A^\alpha D^\beta X^\gamma$, 且 $\alpha = 0.50 \pm 0.01855$, $\beta \approx 0$, $\gamma = -0.20 \pm 0.00674$.

关键词: XY 模型; 滞后标度; Monte Carlo 模拟

中图分类号: O482.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2003) 01-0111-03

磁性物质进入纳米尺度后其磁学性能较常规展现出一系列有趣的变化。其中强磁各向异性磁性纳米晶与弱磁各向异性磁性非晶所组成复合双相磁性体系将具有怎样的新奇磁性, 成了磁学研究者关注的热点^[1-3]。以磁光盘的使用为代表, 薄膜磁性物质应用日益广泛, 将平面各向同性磁性自旋体系的动态响应研究摆上突出的位置。本文采用 Monte Carlo 计算模拟方法, 对平面各向同性自旋体系的稀释 XY 模型进行了数值模拟计算。在经典的 XY 模型中, 分别引进单轴各向异性项和随机各向异性项(分别代表纳米晶和非晶), 研究其在动态驱动外场作用下对磁性体系的各项性能(磁滞损耗 Area、剩余磁化强度 M_r 、矫顽力 H_c 、最大磁能积 $(M \cdot H)_{\max}$)的变化规律, 并给出磁滞损耗 Area 与单轴各向异性常数 A 、随机各向异性项常数 D 和随机各向异性所占比例 X 的指数标度关系。

1 理论基础

对在正弦磁场 $H = h_0 \sin(\omega t)$ (h_0 外场振幅, ω 外场频率)作用下的磁性体系, 其 Hamiltonian 可写成:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - gu \sum_i (\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i) - A \sum_{i=1}^3 \sum_{a=1}^3 (S_i^a)^4 - D \sum_{i=1}^3 [(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{n}_i)^2 - 1] \quad (1)$$

其中

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = a S_i^x S_j^x + b S_i^y S_j^y + c S_i^z S_j^z$$

(1) 式第一项为自旋交换作用能项; 第二项为驱动外场与自旋作用能项; 第三项为单轴各向异性项; 第四项为随机各向异性项。符号 S_i , S_j 分别代表阵点 i , j 的自旋, g 为朗德因子, u 为磁

矩, 交换作用常数 J 取值为 J_{NN} 和 J_{NNN} , 分别代表 i 阵点与最近邻 (NN) 间和次近邻 (NNN) 间的选取的相互作用强度参数, 取决于 J_{NN} 还是 J_{NNN} 被选取, $\sum_i (\)$ 代表最近邻 (NN) 间求和及次近邻 (NNN) 间求和。自旋交换各向异性常数为 a, b, c 。当 $a = b = c = 1$, (1) 式为典型 Heisenberg 模型; 当 $a = b = 0, c = 1$, (1) 式为典型 Ising 模型, 当 $a = b = 1, c = 0$, 则为平面 XY 模型, 此正是本文所采用的模型。 $\mathbf{n}_i$ 是随机方向单位矢量; A, D 分别为单轴各向异性常数和随机各向异性常数, 并用 X 代表随机各向异性所占组分比例, $1 - X$ 代表单轴各向异性所占组分比例。

模拟点阵为三维, 大小为 N^3 , 选取 $N = 60$, 依次重复对整个点阵每个阵点扫描, 扫描次数用 Monte Carlo Step (MCS) 来表示。阵点自旋翻转更新判据采用 Metropolis 准则。相关宏观磁性参量为独立 6 次模拟值的平均, 其中每次独立模拟扫描数达 10 000 MCS, 以确保达到平衡^[4]。

2 计算结果

用 Monte Carlo 方法模拟稀释 XY 模型, 并探讨其动态磁特性随单轴各向异性和随机各向异性的变化的变化趋势。图 1 给出磁滞回线面积 Area, 剩余磁化强度 M_r 、矫顽力 H_c 以及最大磁能级 $(M \times H)_{\max}$ 在变化外磁场驱动下, 随单轴各向异性常数 A 、随机各向异性常数 D 和非晶/纳米晶组成比例 X 的关系。

图 2 给出磁滞回线面积 Area 在不同单轴各向异性常数 A 和随机各向异性常数 D 组合下, 随随机各向异性组份比例 X 的增加呈单调的衰减变化;

^{*} 收稿日期: 2002-06-20

基金项目: 广东省自然科学基金资助项目 (990213)

作者简介: 钟伟荣 (1975 年生), 男, 硕士生; 通讯联系人: 邵元智; E-mail: stdp20@zsu.edu.cn

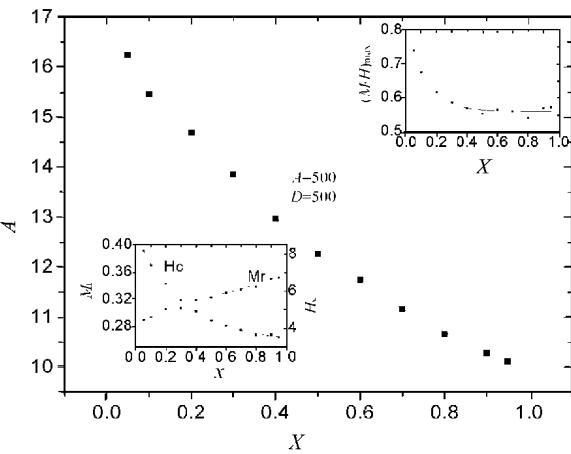


图 1 面积, M_r , H_c 以及 $(M \times H)_{\max}$ 与 X 的关系

Fig 1 Parameter X variations of Area, M_r , H_c and $(M \times H)_{\max}$

磁滞回线面积 Area 随单轴各向异性常数 A 的增大而增大; 而几乎不受随机各向异性常数 D 变化的影响。

图 3 最大磁能级 $(M \times H)_{\max}$ 的数值变化受随机各向异性组份比例 X 的影响, 总体是随随机各向异性组份比例 X 增大而减小。

3 讨论与结论

我们的模拟计算结果表明: 在晶态与非晶态合金里, 物质的硬磁性和软磁性 (表现为磁滞回线的

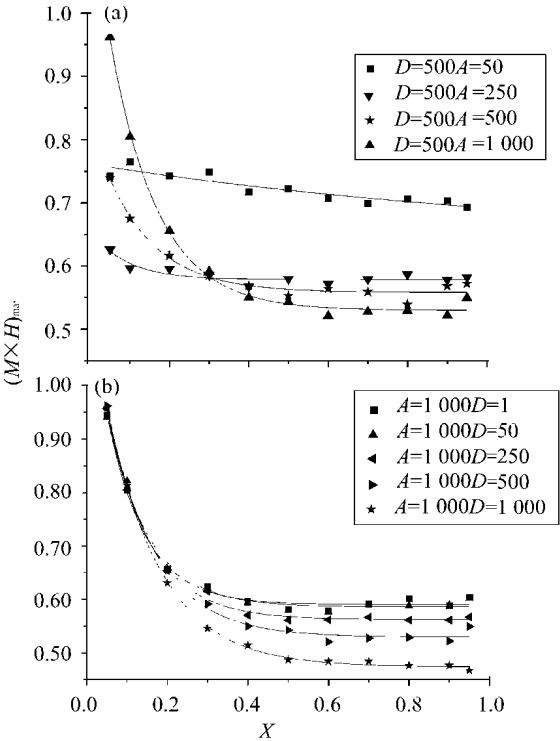


图 3 $(M \times H)_{\max}$ 与 X 的关系

Fig 3 The maximal magnetic energy product change vs parameter X

面积) 与非晶态的百分比含量 X 有关, 当晶态的含量高, 物质表现为硬磁性 (磁滞回线的面积较大), 当非晶态的含量高, 物质表现为软磁性 (磁滞回线的面积较小); 另一方面, 当单轴各向异性 A 越强, 物质越趋向硬磁性, 反之趋向软磁性, 而几乎不受随机各向异性常数 D 变化的影响。

磁性物质的软硬程度 (表现为最大磁能级 $(M \times H)_{\max}$ 的大小) 也受非晶态的百分比含量 X 的影响, 当非晶态含量的增加, 物质趋向于软磁材料, 但当非晶态的含量到达一定比例, 物质的软硬程度不再出现变化; 而其受单轴各向异性常数 A 大小变化的影响与非晶态的百分比含量 X 有关, 当晶态比例 $(1-X)$ 占优, 物质软硬程度与单轴各向异性常数 A 的大小成正比, 当非晶态比例占优, 其与单轴各向异性 A 的大小成反比, 而与随机各向异性常数 D 则始终成反比关系。

鉴于磁化率 $\chi = \frac{M_r}{H_c}$ 中的矫顽力 H_c 只和单轴各

向异性常数 A 的变化成正比, 几乎不受随机各向异性常数 D 变化影响; 而剩余磁化强度 M_r 和单轴各向异性常数 A 及随机各向异性 D 的变化均成反比。得知物质的磁化率与单轴各向异性常数 A 及随机各向异性常数 D 均成反比。

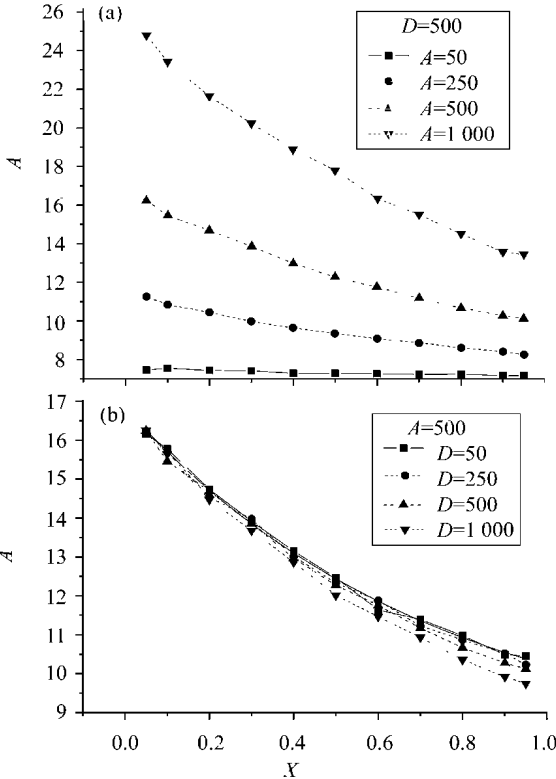


图 2 面积与 X 的关系

Fig 2 Hysteretic loop area change vs parameter X

根据以上变化关系, 得到磁滞后 Area 对单轴各向异性常数 A 、随机各向异性常数 D 和随机各向异性组份比例 X 存在标度关系如下: $\text{Area} \sim A^\alpha D^\beta X^\gamma$, $\alpha=0.50\pm0.018\ 55$, $\beta\approx0$, $\gamma=-0.20\pm0.006\ 7$ (以上数据拟合的相关系数在 0.95 以上)。

参考文献:

[1] SIDES S W, RIKVOLD P A, NOVOTNY M A. Stochastic hysteresis and resonance in a kinetic Ising system[J]. Phys Rev(E), 1998 57: 6512.

[2] ACHARYYA M, CHAKRABARTI B K. Respond of Ising sys-

tem to oscillating and pulsed fields: Hysteresis ac and pulse susceptibility[J]. Phys Rev(B), 1995, 52: 6550

[3] 邵元智, 蓝图, 林光明. 混合自旋体系动态相变的滞后标度[J]. 物理学报, 2001, 50: 942—948.

[4] ACHARYYA M. Nonequilibrium phase trasion in kinetic Ising mode[J]. Phys Rev(E), 1999 59: 218

[5] SHAO Y Z, SHEK C H, LAI J K. Hysteresis scaling and symmetry breaking of the kinetic Heisenberg mode[J]. Phys Stat Sol(b), 1999 214: R11.

[6] 邵元智, 蓝图, 何振辉. 纳米磁性体系的 Monte Carlo 模拟[J]. 中山大学学报(自然科学版), 2000 39: 30.

The Simulation for the Diluted XY Spin System

ZHONG Wei-rong, SHAO Yuan-zhi, TAN Yu-liang, LIN Guang-ming
(Department of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: The magnetic behaviors of the classical discrete XY spin system diluted with both random and uniaxial anisotropic energy terms were simulated numerically by Monte Carlo method. The spin system was driven dynamically by an external magnetic field. Such magnetic characteristics as scaling hysteresis (Area), remnant magnetization (M_r), coercivity (H_c) and maximal magnetic energy product ($M\times H$)_{max} of the system were evaluated with the various combinations of random anisotropy and uniaxial anisotropy. The hysteresis of the system above could be well-scaled in a fomula as: $\text{Area} \sim A^\alpha D^\beta X^\gamma$ with $\alpha=0.55\pm0.018\ 6$, $\gamma=-0.20\pm0.006\ 7$ and $\beta\approx0$, where A , D and X symbolize the uniaxial anisotropic constant, random anisotropic constant and the percentage of the lattice site of random anisotropy respectively.

Key words: XY model; hysteretic scaling; Monte Carlo simulation