

اثر برهم‌کنش تبادلی و ناهمسانگردی یونی منفرد بر حلقه پسماند آلیاژهای

سه‌تایی فری مغناطیس AB_xC_{1-x} با ساختار آمورف

حمزه نخعی مطلق، قاسم رضایی*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

دریافت: 1395/09/17 ویرایش نهایی: 1396/03/11 پذیرش: 1396/08/01

چکیده

خصوصیات مغناطیسی آلیاژهای سه‌تایی فری مغناطیس آمورف با ساختار AB_xC_{1-x} با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو در چارچوب مدل آیزینگ و مدل برهم‌کنش تبادلی $RKKY$ بررسی شده‌است. بدین منظور اثر برهم‌کنش تبادلی و ناهمسانگردی یونی منفرد بر حلقه پسماند مطالعه شده‌است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که منحنی پسماند با تغییر برهم‌کنش تبادلی و ناهمسانگردی یونی تغییر شکل می‌دهد. مشاهده می‌شود که به‌ازای برخی از پارامترها، منحنی‌های پلکانی و حلقه‌های سه‌تایی پسماند ایجاد شده‌است. علاوه بر این مطالعه اثر غلظت بر رفتار حرارتی مغناطیس نشان می‌دهد که در برخی از غلظت‌ها دمای بحرانی جبران در زیر دمای گذار پدیدار شده‌است.

کلیدواژه‌گان: آلیاژهای سه‌تایی، فری مغناطیس، شبیه‌سازی مونت کارلو، مدل $RKKY$ ، برهم‌کنش تبادلی، ناهمسانگردی یونی منفرد، حلقه پسماند

مقدمه

با ساختار مکعبی و شش‌گوشی با اسپین‌های $(1/2, 5/2)$ ، $(3/2)$ [9-12] و $(2, 5/2, 3/2)$ [6] با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو انجام شده‌است. رهیافت‌های ارائه شده با استفاده از این روش به‌طور معمول بر ساختارهای مربعی، مکعبی یا شش‌گوشی متمرکز شده و کارهای بسیار کمی روی سه‌تایی‌های فری مغناطیس با ساختار آمورف در حالت سه بعدی انجام شده‌است. در یکی از معدود کارهای انجام شده یک ساختار آمورف دو بعدی با استفاده از یک شبکه نامنظم، متشکل از اشکال مثلثی و مربعی در یک توزیع کاتوره‌ای شبیه‌سازی شده‌است [13]. علاوه بر این، خصوصیات مغناطیسی آلیاژهای خاکی نادر-فلز واسطه با ساختار آمورف توسط وانگ و همکاران [14] بر مبنای مدلی که در آن واحدهای مغناطیسی به‌صورت خوشه‌های

در سال‌های اخیر مطالعات تجربی و نظری بسیاری روی آلیاژهای سه‌تایی فری مغناطیس با ترکیب AB_xC_{1-x} به‌واسطه کاربرد بی‌شمارشان در حوزه مواد مغناطیسی انجام شده‌است. خصوصیات مغناطیسی این آلیاژها نظیر گذار فاز، حلقه پسماند و پذیرفتاری مغناطیسی به‌وسیله رهیافت‌های نظری مختلفی از قبیل نظریه میدان مؤثر [1-2]، تقریب میدان میانگین [3-6]، توابع گرین [7] و روش مونت کارلو [8-12 و 6] مطالعه شده‌است. در این میان شبیه‌سازی مونت کارلو بر مبنای مدل آیزینگ، یکی از مفیدترین روش‌ها جهت بررسی خصوصیات مغناطیسی سیستم‌های پیچیده‌ای نظیر سه‌تایی‌های فری مغناطیس با ساختار آمورف است. خصوصیات مغناطیسی آلیاژهای سه‌تایی فری مغناطیس

* نویسنده مسئول: grezaei@mail.yu.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

مغناطیسی در نظر گرفته شده‌اند، شبیه‌سازی شده‌است. در این مدل آنها یک توزیع کاتوره‌ای از جهت‌های آسان مغناطش برای خوشه‌ها در نظر گرفتند.

در این مقاله به منظور شبیه‌سازی یک ساختار آمورف از یک توزیع فضایی کاتوره‌ای در فضای شبکه استفاده کرده‌ایم. به نحوی که هر اسپین در یک موقعیت کاملاً کاتوره‌ای در فضا جای‌گیری کرده‌است. هدف اصلی این مقاله، بررسی اثر ناهمسانگردی یونی منفرد و برهم‌کنش تبدالی روی حلقه پسماند آلیاژهای فری مغناطیس آمورف AB_xC_{1-x} با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو است. بدین منظور، یک لایه فوق نازک با ابعاد $N \times N \times L$ را در نظر می‌گیریم. به عنوان یک تقریب، جفت‌شدگی تبدالی بین اسپین‌ها با استفاده از مدل برهم‌کنش تبدالی رودرمن-کیتل-کازویا-یوسیدا ($RKKY$) محاسبه شده‌است. آلیاژهای مورد بررسی در این مقاله از نوع خاکی نادر-فلز واسطه انتخاب شده‌اند. در این آلیاژها، خصوصیات مغناطیسی فلزات خاکی نادر ناشی از پوسته $4f$ نیمه‌پر است که در آن الکترون‌ها به شدت جایگزیده‌اند و برهم‌کنش تبدالی بین دو اسپین همسایه با استفاده از برهم‌کنش تبدالی $RKKY$ توضیح داده می‌شود.

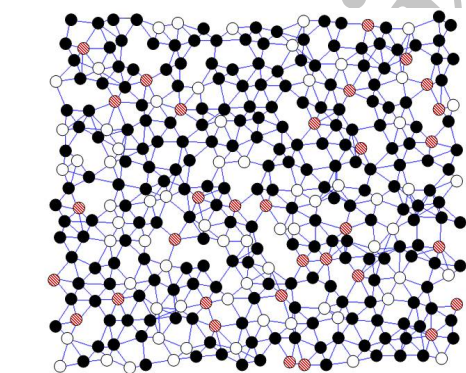
مغناطیسی در نظر گرفته شده‌اند، شبیه‌سازی شده‌است. در این مدل آنها یک توزیع کاتوره‌ای از جهت‌های آسان مغناطش برای خوشه‌ها در نظر گرفتند.

در این مقاله به منظور شبیه‌سازی یک ساختار آمورف از یک توزیع فضایی کاتوره‌ای در فضای شبکه استفاده کرده‌ایم. به نحوی که هر اسپین در یک موقعیت کاملاً کاتوره‌ای در فضا جای‌گیری کرده‌است. هدف اصلی این مقاله، بررسی اثر ناهمسانگردی یونی منفرد و برهم‌کنش تبدالی روی حلقه پسماند آلیاژهای فری مغناطیس آمورف AB_xC_{1-x} با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو است. بدین منظور، یک لایه فوق نازک با ابعاد $N \times N \times L$ را در نظر می‌گیریم. به عنوان یک تقریب، جفت‌شدگی تبدالی بین اسپین‌ها با استفاده از مدل برهم‌کنش تبدالی رودرمن-کیتل-کازویا-یوسیدا ($RKKY$) محاسبه شده‌است. آلیاژهای مورد بررسی در این مقاله از نوع خاکی نادر-فلز واسطه انتخاب شده‌اند. در این آلیاژها، خصوصیات مغناطیسی فلزات خاکی نادر ناشی از پوسته $4f$ نیمه‌پر است که در آن الکترون‌ها به شدت جایگزیده‌اند و برهم‌کنش تبدالی بین دو اسپین همسایه با استفاده از برهم‌کنش تبدالی $RKKY$ توضیح داده می‌شود.

در کار حاضر، ابتدا بر مبنای مدل آیزینگ و مدل برهم‌کنش تبدالی $RKKY$ مدلی از یک آلیاژ فری مغناطیس آمورف ارائه شده و سپس شبیه‌سازی مونت کارلو توضیح داده می‌شود. در انتها، نتایج شبیه‌سازی و بحث در مورد آنها آورده شده‌است.

مدل

به منظور بررسی خصوصیات مغناطیسی آلیاژهای فری مغناطیس سه‌تایی با ترکیب AB_xC_{1-x} دستگاه اسپینی مخلوطی از سه نوع اسپین $S_A = 3/2$ ، $S_B = 1$ و $S_C = 1/2$ در چارچوب مدل آیزینگ را در نظر می‌گیریم. به نحوی که اسپین‌های $S_A = 3/2$ و $S_B = 1$ به ترتیب هر یک از حالت‌های اسپینی $\pm 1/2$ ،



شکل 1. طرح‌واره یک لایه آمورف 18×18 با ساختار سه‌تایی $AB_{0.8}C_{0.2}$

انرژی کل سیستم برهم‌کنشی در حضور میدان مغناطیسی خارجی و ناهمسانگردی یونی منفرد به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{(i,j)} J(R_{ij}) S_i S_j - \sum_i D_i S_i^2 - H_{ext} \sum_i S_i \quad 1$$

که در آن جمله اول سهم برهم‌کنش‌های تبدالی را نشان می‌دهد. ضریب $1/2$ برای جلوگیری از دو بار شمارش

A_{ij} خلاصه کرده‌ایم. J می‌تواند مقادیر مثبت (فرومغناطیس) یا منفی (پادفرومغناطیس) را اختیار کند. در آلیاژهای فلزات خاکی نادر-واسطه برهم‌کنش تبدالی بین گشتاورهای مغناطیسی $3d$ و $4f$ به‌طور معمول از نوع پادفرومغناطیسی است [19]. در این مقاله هر دو برهم‌کنش فرومغناطیس و پادفرومغناطیس بین یونها، که منجر به ایجاد یک ساختار فری مغناطیس می‌شود، در نظر گرفته شده‌اند. در یک ساختار مغناطیسی با ترکیب AB_xC_{1-x} شش نوع برهم‌کنش تبدالی J_{BB} ، J_{AA} ، J_{AB} ، J_{BA} ، J_{AC} ، J_{CA} ، J_{BC} ، J_{CB} اتفاق می‌افتد که در آن پارامترهای تبدالی به‌گونه‌ای تعریف شده‌اند که $J_{AC} < 0$ ، $J_{CC} > 0$ ، $J_{BB} > 0$ ، $J_{AA} > 0$ ، $R_{ij} = 1$ ، $J_{AB} < 0$ و $J_{BC} > 0$ باشند. همچنین، پارامترهای برهم‌کنش تبدالی J_{ij} که در آن $i \neq j$ است با یک تقریب از رابطه $J_{ij} = \pm (J_{ii}J_{jj})^{1/2}$ محاسبه شده‌اند. در این رابطه علامت مثبت، برهم‌کنش‌های فرومغناطیسی (FM) و علامت منفی، برهم‌کنش‌های پادفرومغناطیسی (AFM) را نشان می‌دهند.

شبیه‌سازی مونت کارلو

به‌منظور شبیه‌سازی مدل آیزینگ با استفاده از روش مونت کارلو، از توزیع آماری بولتزمن استفاده می‌کنیم

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-\beta \Delta E)} \quad 3$$

که $\beta = 1/k_B T$ است. در اینجا، k_B و T به ترتیب ثابت بولتزمن و دما را نشان می‌دهند. در این مقاله $k_B = 1$ در نظر گرفته شده است. ΔE ، اختلاف انرژی بین دو حالت اسپینی معکوس شده و معکوس نشده است. احتمال معکوس شدن یک اسپین مطابق با الگوریتم حمام گرمایی و با استفاده از تقریب متروپولیس شبیه‌سازی شده است [15]. در این الگوریتم، میکروحوالاتها به‌صورت کاملاً کاتوره‌ای تولید می‌شوند، بنابراین تعداد گام‌های مونت کارلو در یک حلقه تکرار

جملات در سهم انرژی تبدالی است. $\langle i, j \rangle$ جمع روی نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه را نشان داده و S_i اسپین جایگاه نام است. در دستگاه‌های مغناطیسی واقعی، یکی از پارامترهای تأثیرگذار بر خصوصیات مغناطیسی، تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه است که با کاهش ابعاد می‌تواند تغییر کند. بنابراین، در شبیه‌سازی انجام شده در این مقاله، اثرهای لبه‌ای و سطح بر روی عدد کوردیناسیون (تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه) در نظر گرفته شده است. به‌نحوی که تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه در یک لایه نازک آمورف 18×18 برابر با $5/56$ محاسبه شده است [15]. J_{ij} در جمله اول رابطه 1، پارامتر برهم‌کنش تبدالی بین دو اسپین همسایه را نشان می‌دهد. جمله دوم، سهم انرژی ناهمسانگردی یونی منفرد است که ناهمسانگردی تک محوری در یک ساختار را ایجاد می‌کند. در این جمله، D_i پارامتر ناهمسانگردی یونی منفرد است که در فلزات خاکی نادر به‌طور معمول مقدار آن بزرگ و برای فلزات واسطه مقدار آن کوچک است. H_{ext} میدان مغناطیسی اعمال شده DC در راستای محور آسان مغناطش را نشان می‌دهد. در ترکیب‌های فلزی خاکی نادر-فلز واسطه برهم‌کنش تبدالی بین اسپین‌های خاکی نادر به‌طور معمول با استفاده از مدل برهم‌کنش تبدالی $RKKY$ [16-18] توضیح داده می‌شود. در این مدل برهم‌کنش تبدالی بین دو اسپین همسایه از طریق الکترون‌های آزاد محیط انجام می‌شود. با توجه به مدل $RKKY$ پارامتر تبدالی با معادله زیر توصیف می‌شود [16]:

$$J_{RKKY} = A_{ij} F(x) \quad 2$$

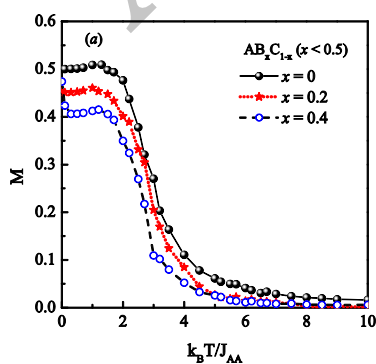
$$F(x) = \frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x^4}$$

که در آن $x = 2k_F R_{ij}$ است. k_F بردار موج فرمی و A_{ij} شدت برهم‌کنش تبدالی را نشان می‌دهند. در واقع J_{RKKY} به انرژی فرمی و برهم‌کنش $s-d$ وابسته است که در اینجا برای ساده‌سازی، همه این اثرها را در پارامتر

می گیرند. در انتها، اثر ناهمسانگردی یونی و برهم کنش تبدالی بر منحنی پذیرفتاری مغناطیسی برحسب میدان اعمال شده ($\chi-H$) تجزیه و تحلیل می شوند.

الف: اثر غلظت بر رفتار حرارتی مغناطش

در شکل 2 رفتار حرارتی مغناطش میانگین برحسب مقادیر مختلف x برای یک سه تایی فری مغناطیسی AB_xC_{1-x} با ساختار آمورف، نشان داده شده است. در این شبیه سازی فرض کرده ایم که برهم کنش تبدالی بین جفت اسپین ها مطابق معادله 2 از مدل $RKKY$ پیروی می کند. در محاسبات از مقادیر $J_{CC}/J_{AA} = 3$ و $J_{BB}/J_{AA} = 5$ برای برهم کنش تبدالی، و از مقادیر $D_A/J_{AA} = 3$ ، $D_B/J_{AA} = 0.5$ و $D_C/J_{AA} = 1$ برای پارامترهای ناهمسانگردی یونی منفرد، استفاده شده است. در انتخاب این پارامترها از این واقعیت استفاده شده است که ناهمسانگردی یونی عناصر خاکی نادر (A) در مقایسه با فلزات واسطه (B و C) بزرگتر است. نتایج نشان می دهند که رفتار منحنی مغناطش برحسب دما برای غلظت های $x > 0.5$ با رفتار آن به ازای $x < 0.5$ متفاوت است. با توجه به شکل 2-a ملاحظه می شود که در بازه $x < 0.5$ رفتار منحنی مغناطش برحسب دما، با توجه به تقسیم بندی نیل [20]، از نوع S است.



نقش بسیار مهمی را در پایداری و اطمینان پذیری نتایج بازی می کند. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که با افزایش گام های مونت کارلو پایداری نتایج افزایش یافته است. از این رو برای ضمانت درستی نتایج، تعداد گام های مونت کارلو برابر با 10^4 انتخاب شده است. همچنین، به منظور تولید یک ساختار آمورف ابتدا یک شبکه بلوری با ساختار مکعبی ساده و ثابت شبکه $a=1$ ایجاد شده که در آن اسپین های A ، B و C در جایگاه های شبکه به صورت کاملاً کاتوره ای توزیع می شوند. سپس هر اسپین حول موقعیت تعادلی اش به صورت کاتوره ای جابه جا شده است به نحوی که در نهایت ساختاری مشابه با ساختار شکل 1 ایجاد می شود. علاوه بر این، با توجه به خاصیت کاتوره ای بودن ساختار آمورف، ابتدا 10^4 ساختار با موقعیت کاتوره ای تولید کرده و سپس با میانگین گیری روی فواصل بین اتمی، محتمل ترین ساختار در الگوریتم شبیه سازی وارد شده است. در نهایت، مغناطش میانگین هر جایگاه از رابطه زیر محاسبه می شود

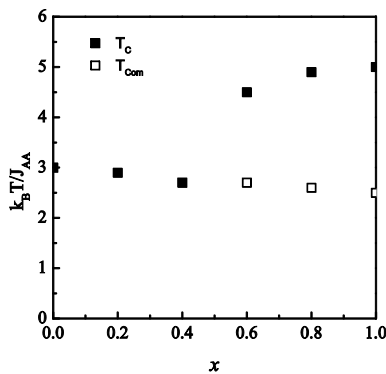
$$M = \frac{1}{N_{tot}} \sum_i S_i \quad 3$$

در این جا $N_{tot} = N \times N \times L$ تعداد کل اتم های ساختار را نشان می دهد. به منظور محاسبه دماهای بحرانی و پذیرفتاری مغناطیسی به ترتیب، از مشتق اول مغناطش نسبت به دما (dM/dT) و مشتق اول مغناطش نسبت میدان مغناطیسی (dM/dH) استفاده می شود.

نتایج و بحث

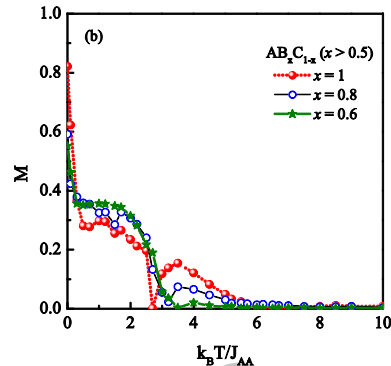
ابتدا در قسمت الف اثر غلظت روی رفتار حرارتی مغناطش بررسی می شود. سپس در قسمت های ب و ج به ترتیب اثرهای برهم کنش تبدالی و ناهمسانگردی یونی منفرد بر حلقه پسماند با جزئیات مورد بحث قرار

فرومغناطیسی قوی قابل مشاهده است، به یک حالت فری مغناطیسی ضعیف گذار می‌کند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که گذار فاز فری مغناطیس به پارامغناطیس از نوع گذار مرتبه دوم است. علاوه بر این، می‌توان دید که به واسطه اثر خشی سازی تبادلی قوی در دماهای بسیار پایین به ازای $x=1$ (ترکیب AB)، گذار فاز مرتبه اول فری مغناطیس-فری مغناطیس اتفاق افتاده است.



شکل 3. دیاگرام فاز در صفحه $(x, k_B T / J_{AA})$.

شکل 3 دیاگرام فاز را در صفحه $(x, k_B T / J_{AA})$ نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش غلظت x در بازه $0 < x < 0.5$ دمای بحرانی T_C کاهش یافته است در حالی که به ازای $x > 0.5$ با افزایش غلظت، دمای بحرانی حداکثر تا مقدار $k_B T_C / J_{AA} = 5$ افزایش یافته است. به عبارتی دمای گذار یک آلیاژ دوتایی AB بالاتر از آلیاژهای سه تایی $AB_x C_{1-x}$ به دست آمده است. همچنین نتایج نشان می‌دهند که دمای کوری آلیاژ دوتایی AC که به ازای $x=0$ ایجاد شده است، در بازه $0.5 < x$ ، بالاتر از یک سه تایی فری مغناطیس با ترکیب $AB_x C_{1-x}$ است. همچنین می‌توان دید که اضافه کردن عنصر B با برهم کنش تبادلی قوی ($J_{BB} > J_{CC} > J_{AA}$) در غلظت‌های $x > 0.5$ سبب افزایش دمای کوری سیستم شده است. نتایج نشان می‌دهند که دمای بحرانی جبران در این بازه از غلظت



شکل 2. رفتار حرارتی مغناطش در غلظت‌های مختلف برای یک سه تایی فری مغناطیسی $AB_x C_{1-x}$ با ساختار آمورف.

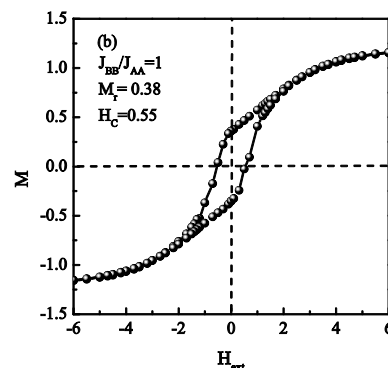
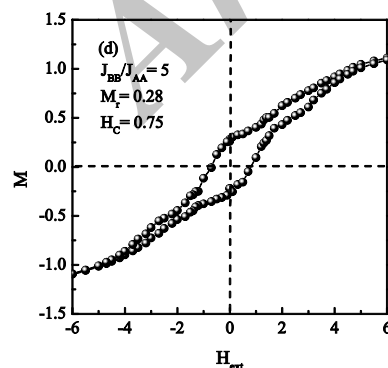
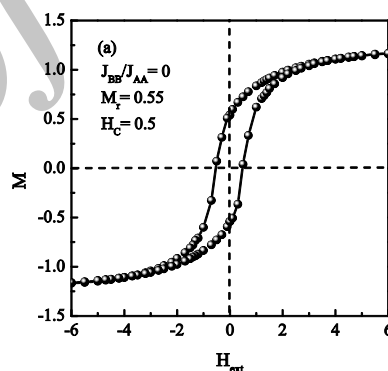
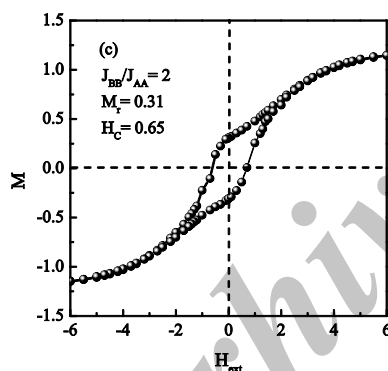
همچنین مشاهده می‌شود که به طور معمول در این بازه، آلیاژهای سه تایی فری مغناطیس $AB_x C_{1-x}$ با ساختار آمورف، رفتار مغناطیسی مشابهی مانند ساختارهای فرومغناطیسی از خود بروز می‌دهند. به عبارتی در این بازه از غلظت که درصد یون‌های مغناطیسی B در مقایسه با یون‌های A و C کمتر است، اثر خشی سازی تبادلی تنها در دماهای بسیار پایین غلبه کرده و ماده در دماهای بالاتر همانند مواد فرومغناطیس با یک گذار فاز مرتبه دوم از حالت فری مغناطیس به حالت پارامغناطیس می‌رود. اثر خشی سازی تبادلی در مواد فری مغناطیس که شامل هر دو نوع برهم کنش تبادلی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس هستند ایجاد می‌شود. با توجه به شکل 2-b رفتار منحنی مغناطش برحسب دما در بازه $0.5 < x < 1$ به صورت فری مغناطیسی است که در آن اثر خشی سازی تبادلی تأثیر قابل توجهی بر مغناطش سیستم گذاشته است. در این بازه مشاهده می‌شود که علاوه بر وجود دمای گذار فری مغناطیس به پارامغناطیس (T_C) یک دمای بحرانی در زیر دمای T_C به نام دمای جبران (T_{com}) ایجاد شده است که در آن مغناطش سه تایی فری مغناطیس صفر است. علاوه بر این، با توجه به شکل 2-b مشاهده می‌شود که با افزایش دما، مغناطش ماده در بازه دمایی $T_C < T < T_{com}$ به سبب باز نظم‌دهی اسپینی که در ساختارهای فری مغناطیسی با برهم کنش پاد

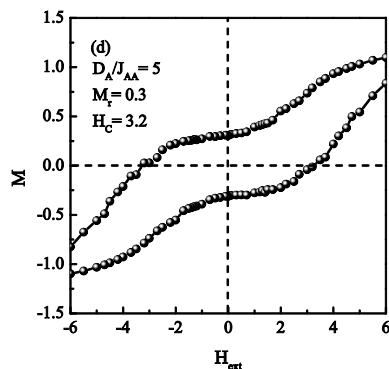
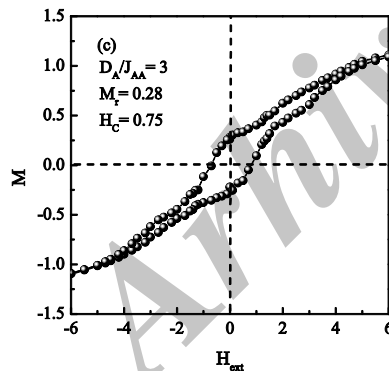
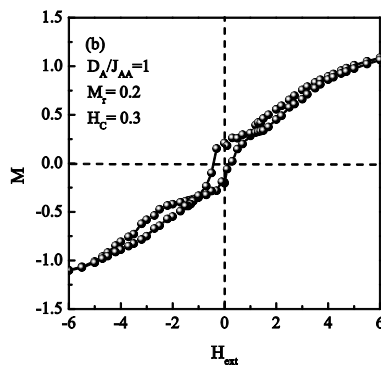
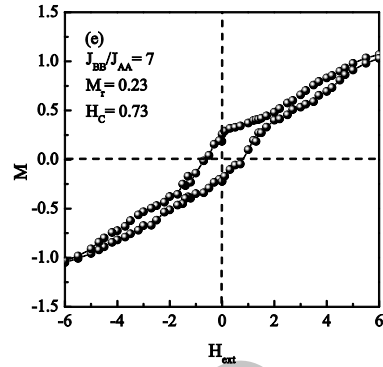
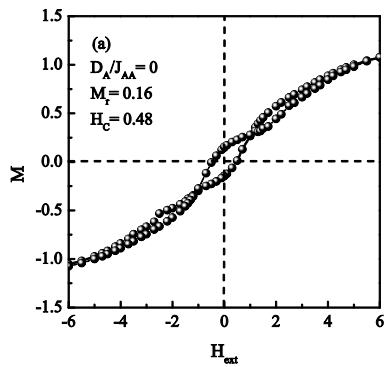
بین اسپین‌های C برابر با $J_{CC}/J_{AA} = 3$ باشد و پارامتر تبدیلی J_{BB}/J_{AA} تغییر کند. پارامترهای ناهمسانگردی یونی منفرد $D_A/J_{AA} = 3$ ، $D_B/J_{AA} = 0.5$ و $D_C/J_{AA} = 1$ در نظر گرفته شده‌اند. با توجه به نتایج، با افزایش برهم کنش تبدیلی J_{BB}/J_{AA} از مقدار صفر تا 7، منحنی پسماند از یک تک حلقه مرکزی به سمت یک منحنی پلکانی تغییر شکل داده است. چنین مسئله‌ای می‌تواند ناشی از رقابت بین برهم کنش‌های تبدیلی فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی در یک ساختار فری مغناطیس باشد که با افزایش نسبت J_{BB}/J_{AA} افزایش یافته است.

به مقدار اندکی کاهش یافته است. به نحوی که در $x=1$ (آلیاژ دوتایی AB) دمای جبران $k_B T_{com}/J_{AA} = 2.5$ به دست آمده است.

(ب) اثر برهم کنش تبدیلی بر حلقه پسماند

شکل‌های 4-a تا 4-e اثر برهم کنش تبدیلی، روی منحنی پسماند (نمودار $M-H$) یک سه‌تایی فری مغناطیسی $AB_{0.8}C_{0.2}$ با ساختار آمورف را نشان می‌دهند. شبیه‌سازی‌ها در زیر دمای بحرانی جبران و به ازای $k_B T/J_{AA} = 2$ انجام شده‌اند. در این شبیه‌سازی فرض کرده‌ایم که پارامتر برهم کنش تبدیلی





شکل 4. اثر برهم‌کنش تبادل J_{BB}/J_{AA} بر منحنی پسماند (نمودار $M-H$) یک سه‌تایی فری‌مغناطیسی $AB_{0.8}C_{0.2}$ با ساختار آمورف به‌ازای $D_A/J_{AA}=3$ ، $J_{CC}/J_{AA}=3$ ، $k_B T/J_{AA}=2$ ، $D_C/J_{AA}=1$ و $D_B/J_{AA}=0.5$

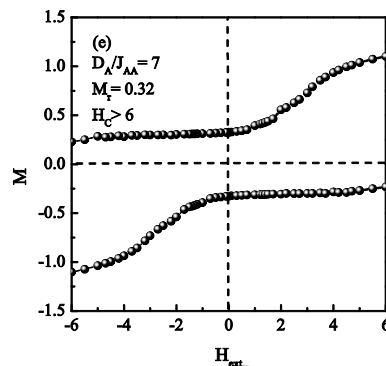
به‌عبارتی به‌واسطه اثر خنثی‌سازی تبادلی، منحنی پسماند ماده از یک رفتار فرومغناطیسی به منحنی‌های نابهنجار تغییر شکل می‌دهد. به‌نحوی که در مقادیر 5 و 7، به‌ترتیب در شکل‌های 4-d و 4-e حلقه‌های پسماند پلکانی تشکیل شده است. نتایج همچنین نشان می‌دهند که تغییرات میدان وادرندهگی (H_C) و همچنین مغناطش باقیمانده به‌ازای هر اسپین (M_r) بسیار کم است. به‌عبارتی تغییر J_{BB}/J_{AA} تأثیر قابل‌ملاحظه‌ای بر M_r و H_C نگذاشته است. M_r مقدار مغناطش سیستم در میدان مغناطیسی اعمال شده صفر ($H_{ext}=0$) بوده و میدان وادرندهگی به میدانی گفته می‌شود که مقدار مغناطش سیستم در آن صفر می‌شود. نتایج مشابهی برای رفتار پلکانی منحنی پسماند به‌صورت نظری [21] و تجربی [22-23] در چند لایه‌ای‌های نازک مغناطیسی گزارش شده است.

ج) اثر ناهمسانگردی یونی بر حلقه پسماند

دماهای پایین به دست آمده است [21]. علاوه بر این، منحنی‌های پسماند سه حلقه‌ای در دولایه‌ای‌های مغناطیسی با برهم کنش فرومغناطیس-پادفرومغناطیس، که با استفاده از روش تابع گرین مطالعه شده است، به دست آمده‌اند [22]. چنین منحنی‌هایی در نتایج تجربی نیز گزارش شده است [23-24].

نتایج در شکل‌های 5-c و 5-d نشان می‌دهند که به ازای $D_A/J_{AA} \geq 3$ ، حلقه‌های پسماند پلکانی ایجاد شده است، که در آنها با افزایش D_A/J_{AA} میدان وادارندگی H_C افزایش یافته است. به نحوی که در $D_A/J_{AA} = 7$ میدان وادارندگی بزرگتر از 6 به دست آمده است. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که در ناهمسانگردی‌های $D_A/J_{AA} = 0$ و $D_A/J_{AA} = 1$ مغناطش باقیمانده در حالت میدان معکوس منفی شده است. این به معنای معکوس شدن اسپین‌های سیستم در میدان مغناطیسی صفر است. چنین اثری در چندلایه‌ای‌های مغناطیسی $Co/Mn/Co$ رشد داده شده روی بستر $GaAs$ [23] و چند لایه‌ای $Co/Pt/Gd/Pt$ [24] مشاهده شده است. که در آنها برهم کنش بین لایه‌ها به صورت پادفرومغناطیسی گزارش شده است. تجزیه و تحلیل عمیق‌تر نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که پدیده مغناطش باقیمانده منفی در مواد فرومغناطیس آیزینگ اتفاق نمی‌افتد. نتایج همچنین نشان می‌دهند که با افزایش ناهمسانگردی یونی به ازای $D_A/J_{AA} \geq 3$ پدیده مغناطش باقیمانده منفی از بین رفته است.

در شکل 6 نمودار تغییرات M_r و میدان وادارندگی، H_C بر حسب J_{BB}/J_{AA} و D_A/J_{AA} نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهند که تأثیر ناهمسانگردی یونی بر میدان وادارندگی سه‌تایی فری مغناطیس به مراتب بیشتر از تأثیر برهم کنش تبدیلی است. نتایج همچنین نشان می‌دهند که افزایش J_{BB}/J_{AA} و D_A/J_{AA}

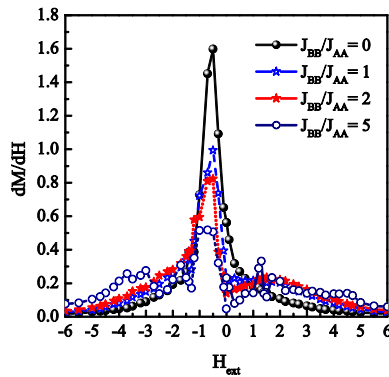


شکل 5. اثر ناهمسانگردی یونی منفرد D_A/J_{AA} بر حلقه پسماند یک سه‌تایی فری مغناطیسی $AB_{0.8}C_{0.2}$ با ساختار آمورف در بازه میدان اعمال شده $-6 \leq H_{ext} \leq 6$ به ازای $k_B T/J_{AA} = 2$ ، $D_C/J_{AA} = 1$ و $D_B/J_{AA} = 0/5$ ، $J_{BB}/J_{AA} = 5$ ، $J_{CC}/J_{AA} = 3$

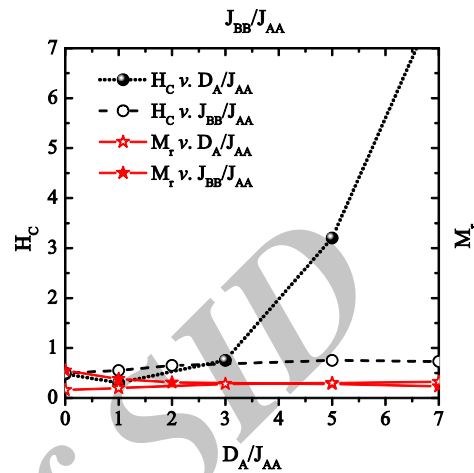
در شکل 5 اثر ناهمسانگردی یونی منفرد D_A/J_{AA} روی حلقه پسماند یک آلیاژ سه‌تایی فری مغناطیس آمورف با ترکیب $AB_{0.8}C_{0.2}$ نشان داده شده است. شبیه‌سازی نمونه‌ها در $k_B T_c/J_{AA} = 2$ و در بازه میدان مغناطیسی اعمال شده $-6 \leq H_{ext} \leq 6$ انجام شده است. در این شبیه‌سازی پارامترهای برهم کنش تبدیلی و ناهمسانگردی یونی منفرد عبارتند از: $D_B/J_{AA} = 0/5$ ، $J_{BB}/J_{AA} = 5$ ، $J_{CC}/J_{AA} = 3$ و $D_C/J_{AA} = 1$. با توجه به شکل‌های 5-a و 5-b می‌بینیم که به ازای $D_A/J_{AA} = 0$ و $D_A/J_{AA} = 1$ به جای یک تک حلقه در منحنی پسماند، منحنی‌های سه حلقه‌ای ایجاد شده است. چنین پدیده‌ای می‌تواند ناشی از غلبه اثر خنثی‌سازی تبدیلی در میدان‌های ضعیف باشد که در آن رفتار مغناطش ماده در نتیجه رقابت بین برهم کنش‌های فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی به‌طور کامل با رفتار یک ماده فرومغناطیس معمولی در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی، متفاوت می‌شود. نتایج شبیه‌سازی مونت کارلوی مشابه‌ای برای نانوسیم‌های هسته-پوسته با اسپین 1 در ناهمسانگردی یونی صفر و در محدوده

خستگی سازی تبدالی نابهنجاری قوی تری را با تغییر ناهمسانگردی یونی منفرد ایجاد کرده است.

تأثیر قابل توجهی بر قدر مطلق مغناطش باقیمانده، $|M_r|$ ندارد.

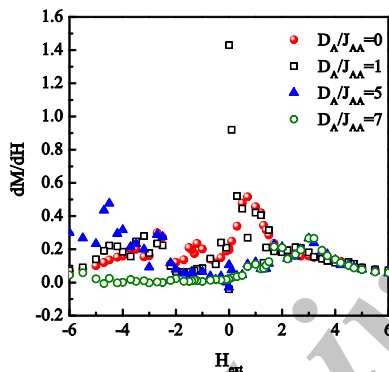


شکل 7. اثر J_{BB}/J_{AA} بر منحنی پذیرفتاری مغناطیسی.



شکل 6. نمودار تغییرات M_r و میدان وادارندگی، H_C بر حسب

D_A/J_{AA} و J_{BB}/J_{AA}



شکل 8. اثر D_A/J_{AA} بر منحنی پذیرفتاری مغناطیسی.

شکل‌های 7 و 8 به ترتیب، تأثیر J_{BB}/J_{AA} و D_A/J_{AA} را بر منحنی پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب میدان اعمال شده نشان می‌دهند. با توجه به نتایج به دست آمده در شکل 7، قله پذیرفتاری مغناطیسی با افزایش برهم‌کنش تبدالی J_{BB}/J_{AA} کاهش یافته است. نتایج نشان می‌دهند که منحنی پذیرفتاری مغناطیسی با افزایش میدان اعمال شده در جهت محور ناهمسانگردی و در خلاف جهت آن رفتار تقریباً متقارنی را از خود نشان می‌دهد. علاوه بر این، ملاحظه می‌شود که در یک میدان خاص یک قله در منحنی پذیرفتاری مغناطیسی ایجاد شده است. بررسی نتایج در شکل 8 نشان می‌دهند که چنین رفتار منظمی در منحنی پذیرفتاری مغناطیسی با تغییر ناهمسانگردی دیده نمی‌شود. به عبارتی منحنی مغناطش در میدان‌های مغناطیسی مختلف با تغییر ناهمسانگردی یونی منفرد دستخوش افت و خیزهای شدیدتری نسبت به پارامتر برهم‌کنش تبدالی شده است. این بدان معنا است که اثر

نتیجه‌گیری

وابستگی منحنی پسماند به پارامترهای برهم‌کنش تبدالی و ناهمسانگردی یونی منفرد با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو بررسی شده است. برای این منظور یک ساختار فری مغناطیس اسپینی $(1, 1/2, 3/2)$ (آمورف با ترکیب AB_xC_{1-x} در نظر گرفته شده است. به منظور تولید یک ساختار آمورف، توزیع فضایی از موقعیت‌های کاملاً تصادفی با استفاده از الگوریتم مونت کارلو ایجاد شده است. در این شبیه‌سازی برای توصیف برهم‌کنش تبدالی بین جفت اسپین‌ها از مدل $RKKY$ در چارچوب مدل آیزینگ استفاده شده است. نتایج نشان

- [7] G. Mert, Green's function study of a three-sublattice mixed-spin Heisenberg ferromagnetic and ferrimagnetic system, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **363** (2014) 224-231.
- [8] M. Zukovic, A. Bobak, Critical and compensation phenomena in a mixed-spin ternary alloy: a Monte Carlo study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **322** (2010) 2868-2873.
- [9] G.M. Buendia, J.E. Villarroel, Compensation temperatures of mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloys, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **310** (2007) e495-e497.
- [10] J. Dely, A. Bobak and D. Horvath, Mean-Field and Monte Carlo Study of a Mixed Ferro-Ferrimagnetic Ternary Alloy, *Acta Physica Polonica A* **113** (2008) 461-464.
- [11] E. Vatansever, Y. Yüksel, Dynamic phenomena in magnetic ternary alloys, *Journal of Alloys and Compounds* **689** (2016) 446-450.
- [12] S. Tsuji, T. Kasama, T. Idogaki, Decoration-iteration transformation and Monte Carlo simulation for mixed ferrimagnetic ternary alloy, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **310** (2007) e471-e473.
- [13] H. Kawamura, A Simplified Model of Phase Transition in Amorphous Antiferromagnets. II: Effect of the Magnetic Field, *progress of Theoretical physics* **70** (1983) 1197-1206.
- [14] L. Wang, J. Ding, H. Z. Kong, Y. Li, Y.P. Feng, Monte Carlo simulation of a cluster system with strong interaction and random anisotropy, *Physical Review B* **64** (2001) 214410.
- [15] H. Nakhaei Motlagh, G. Rezaei, Magnetic properties of ferro-ferrimagnetic ternary alloys with $A_y(B_xC_{1-x})_{1-y}$ amorphous structures: Effects of concentration, temperature and magnetic field, *Journal of Alloys and compounds* **711** (2017) 677-685.
- [16] M.A. Ruderman, C. Kittel, Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons, *Physical Review* **96** (1954) 99.
- [17] T. Kasuya, A theory of Metallic Ferro and Antiferromagnetism on Zener's Model, *Progress of Theoretical Physics* **16** (1956) 45-57.
- [18] K. Yosida, Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys, *Physical Review* **106** (1957) 893.
- می‌دهند که با تغییر پارامترهای برهم کنش تبدالی و ناهمسانگردی یونی، حلقه پسماند تغییر شکل می‌دهد. به نحوی که در برخی موارد منحنی‌های پلکانی و حلقه‌های سه‌تایی تشکیل شده است. چنین رفتار نابهنجاری در منحنی‌های پسماند یک ساختار سه‌تایی فری مغناطیس می‌تواند ناشی از رقابت بین برهم کنش‌های تبدالی فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی در میدان‌های ضعیف باشد. به عبارتی خنثی‌سازی تبدالی در میدان‌های ضعیف یکی از مهمترین عوامل ایجاد منحنی‌های پلکانی و حلقه‌های سه‌تایی شناخته شده است. همچنین رفتار حرارتی مغناطش در غلظت‌های مختلف B نیز بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که به ازای برخی از غلظت‌ها، دمای بحرانی جریان در زیر دمای کوری پدیدار شده است.

مراجع

- [1] H. Hu, Z. Xin, W. Liu, Magnetic properties of the mixed ferro-ferrimagnets composed of Prussian blue analogs with $(A_xB_{1-x})_yC$, *Physics Letters A* **357** (2006) 388-392.
- [2] A. Bobak, O.F. Abubrig, D. Horvath, Magnetic properties of a mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy, *Physica A* **312** (2002) 187-207.
- [3] A. Bobak, F.O. Abubrig, T. Balcerzak, Phase diagrams of the mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272-276** (2004) 989-990.
- [4] J. Dely, A. Bobak, Magnetic properties of the ternary alloy with a structure of Prussian blue analogs, *Physica B* **388** (2007) 49-58.
- [5] J. Dely, A. Bobak, Phase diagrams of the ternary alloy with a single-ion anisotropy in the mean-field approximation, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **305** (2006) 464-466.
- [6] J. Dely, A. Bobak, M. Zukovi, Critical temperature of a mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy, *Journal of Physics: Conference Series* **200** (2010) 022005.

- [22] H.Y. Wang, K. Xun, L. Xiao, Individual monolayer analysis of anomalous hysteresis loops, *Physical Review B* **70** (2004) 214431.
- [23] Y.Z. Wu, G.S. Dong, X.F. Jin, Negative magnetic remanence in Co/Mn/Co grown on GaAs(001), *Physical Review B* **64** (2001) 214406.
- [24] K. Takanashi, H. Kurokawa, H. Fujimori, A novel hysteresis loop and indirect exchange coupling in Co/Pt/Gd/Pt multilayer films, *Applied Physics Letters* **63** (1993) 1585-1587.
- [19] A.G. Dirks, J.W.M. Biesterbos, K.H.J. Buschow, Magnetic compensation temperatures of amorphous rare earth-cobalt alloys, *Physica B* **86** (1977) 761-763.
- [20] L. Neel, Magnetic properties of ferrites: ferrimagnetism and antiferromagnetism, *Ann. Phys. Paris* **3** (1948) 98-137.
- [21] H. Magoussi, A. Zaim, M. Kerouad, Monte Carlo simulation of magnetic properties of spin-1 Blume-Capel nanowire, *Solid State Communications* **200** (2014) 32-41.

Archive of SID