

СУМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ЛЮТЫЙ ТАРАС ВЛАДИМИРОВИЧ

УДК 537.624

**МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В ДВУМЕРНЫХ
АНСАМБЛЯХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ**

01.04.11 – магнетизм

Диссертация на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научные руководители

ДЕНИСОВ СТАНИСЛАВ ИВАНОВИЧ

Доктор физико-математических наук, профессор

KALLIOPİ TROHIDOU

Doctor of Physics, Senior Scientist

СУМЫ – 2004

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
РАЗДЕЛ 1 Литературный обзор.....	10
РАЗДЕЛ 2 Среднеполевая теория магнитной релаксации.....	23
2.1. Обоснование модели и метода исследования.....	23
2.2. Модель и основные соотношения.....	28
2.3. Закон магнитной релаксации.....	35
2.4. Численный анализ закона магнитной релаксации.....	50
2.5. Релаксация при наличии поля смещения.....	55
Выводы к разделу 2.....	65
РАЗДЕЛ 3 Численное моделирование магнитной релаксации.....	68
3.1. Теоретическое обоснование алгоритма.....	70
1.3.1. Уравнение для приведенной намагниченности.....	70
1.3.2. Плотность вероятности переориентации.....	72
1.3.3. Влияние поля смещения на вероятность переориентации.....	80
3.2. Алгоритм вычислений.....	82
Выводы к разделу 3.....	87
РАЗДЕЛ 4 Численные результаты и их обсуждение.....	88
4.1. Исследование размерных эффектов.....	88
4.2. Влияние типа упаковки на магнитную релаксацию.....	97
4.3. Релаксация в поле смещения.....	100
4.4. Об аппроксимации закона релаксации различными зависимостями.....	104
Выводы к разделу 4.....	108

ЗАКЛЮЧЕНИЕ	110
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	112
ПРИЛОЖЕНИЕ А Соответствие между стохастическим уравнением Ландау-Лифшица и уравнением Фоккера-Планка.....	125
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Текст программы на языке Delphi	128

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы

В последнее время материалы с нанокластерной структурой стали объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. В первую очередь это обусловлено широкими перспективами использования нанотехнологий в промышленности и медицине. Одним из наиболее интересных с теоретической и практической точек зрения примеров таких материалов являются системы магнитных наночастиц. Так, мелкодисперсные частицы ферромагнетика, взвешенные в жидкости, в силу своих уникальных транспортных свойств, находят применение в медицине, а частицы, размещённые в немагнитной твёрдой матрице, представляют собой новые композитные материалы электроники, использование которых позволит существенно улучшить характеристики современной вычислительной техники. В частности, двумерные (2D) системы ферромагнитных наночастиц с одноосной перпендикулярной анизотропией образуют важный класс магнитных накопителей с перпендикулярной записью (perpendicular media). О перспективности таких устройств свидетельствует тот факт, что в 2002 году американским Институтом инженеров по электротехнике и электронике (IEEE) была учреждена ежегодная конференция, посвящённая проблемам перпендикулярной записи информации (NAPMRC).

Среди факторов, определяющих магнитные свойства 2D ансамблей ферромагнитных наночастиц, одним из наиболее важных является магнитное диполь-дипольное взаимодействие, которое может не только изменять поведение таких систем, но и приводить к появлению в них качественно новых, коллективных эффектов. Их описание является весьма нетривиальной задачей, сложность которой многократно возрастает при отсутствии термодинамического равновесия, как в случае термоиндуцированной магнитной релаксации. Вместе с тем, развитие аналитических и численных методов расчета закона релаксации имеет как общетеоретическое значение, определяемое неравновесностью сис-

темы, далекодействующим характером магнитного дипольного взаимодействия и ролью корреляционных эффектов, так и прикладное, поскольку эти методы дают возможность находить численные характеристики релаксации, в том числе среднее время сохранения информации.

В настоящее время теоретическое исследование магнитной релаксации в 2D ансамблях взаимодействующих наночастиц проводится, главным образом, в приближении среднего дипольного поля и численными методами Монте-Карло. Очевидно, однако, что для более корректного аналитического описания особенностей релаксации необходимо использовать среднее значение *локального* дипольного поля, т.е. дипольного поля в месте расположения наночастиц. Применение стандартных методов Монте-Карло, строго говоря, также не оправданно, поскольку они описывают лишь равновесные состояния. Однако даже если их использование можно обосновать, как, например, в случае релаксации квазиравновесных ансамблей, возникает сложная проблема нахождения соответствия между шагами Монте-Карло и временными интервалами, которая до сих пор не имеет удовлетворительного решения. Указанные обстоятельства свидетельствуют об актуальности как исследования магнитной релаксации в данных системах, так и развития аналитических и численных методов ее описания.

Связь работы с научными программами, планами, темами

Диссертационная работа выполнялась на кафедре общей и экспериментальной физики Сумского государственного университета в рамках тематических планов научно-исследовательских работ Министерства образования и науки Украины:

1. тема № 71.01.03.00-02 г/б “Кооперативные эффекты в ансамблях магнитных наночастиц”, № гос. регистрации 0100U003229;
2. тема № 71.01.04.03-05 г/б “Статистические характеристики динамических систем с флуктуирующими параметрами”, № гос. регистрации 0103U000766;

а также в рамках международного проекта по программе НАТО «Study of magnetic relaxation in 2D nanoparticle ensembles», CLG Ref. No. PST.CLG.978108.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является установление общих закономерностей в термоиндуцированной релаксации намагниченности 2D ансамблей одноосных ферромагнитных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией, обусловленных магнитным дипольным взаимодействием. Для достижения данной цели необходимо решить следующие задачи:

- вывести обыкновенное дифференциальное уравнение, определяющее закон магнитной релаксации 2D решеток ферромагнитных наночастиц в приближении среднего локального дипольного поля;
- путем его численного и аналитического решения изучить влияние магнитного поля смещения, среднего локального поля и структуры решетки на закон релаксации;
- определить вероятности термоиндуцированной переориентации магнитных моментов наночастиц и получить уравнение, связывающее эти вероятности с намагниченностью системы;
- развить численную процедуру расчета намагниченности, учитывающую действие термостата и влияние корреляций направлений магнитных моментов наночастиц;
- провести сравнительный анализ законов релаксации, найденных в рамках среднеполевой теории и полученных путем численного моделирования.

Объектом исследования является процесс термоиндуцированной релаксации намагниченности в 2D ансамблях ферромагнитных наночастиц.

Предметом исследования является роль магнитного дипольного взаимодействия в формировании закона релаксации намагниченности 2D решеток одноосных ферромагнитных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией.

Методы исследования. Для описания динамики магнитных моментов использовалось стохастическое уравнение Ландау-Лифшица, а также прямое и обратное уравнения Фоккера-Планка; для аппроксимации действия локальных дипольных полей использовалось приближение среднего поля; для определения

величины среднего дипольного поля использовались методы математической статистики; методом Рунге-Кутты решалось дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию намагниченности; плотности вероятности переориентации магнитных моментов находились с использованием асимптотических методов; изучение влияния динамических корреляций проводилось методами компьютерного моделирования.

Научная новизна полученных результатов

Настоящая диссертация представляет собой наиболее полное и содержательное исследование влияния дипольного взаимодействия на магнитную релаксацию в двумерных ансамблях наночастиц. В частности, автором получены следующие конкретные результаты:

1. Построена среднеполевая теория релаксации намагниченности 2D решеток одноосных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией, которые взаимодействуют диполь-дипольным образом. Теория основана на использовании функции распределения для магнитного момента произвольной наночастицы, которая удовлетворяет уравнению Фоккера-Планка и, в отличие от обычного приближения среднего поля, оперирует не средним дипольным полем, а средним значением локального дипольного поля в местах расположения наночастиц. В её рамках впервые всесторонне изучено влияние магнитного поля смещения, среднего локального дипольного поля и структуры решетки на характер магнитной релаксации.

2. Разработан новый, не имеющий аналогов метод численного моделирования магнитной релаксации в данных системах, основанный на аналитическом нахождении вероятностей переориентации магнитных моментов наночастиц и на численном определении состояния системы в дискретные моменты времени. Уникальность этого метода состоит в том, что закон релаксации находится как функция реального времени, а не шагов Монте-Карло, и применим он на временных интервалах, верхняя граница которых может достигать десятков и даже сотен тысяч лет при приемлемых затратах машинного времени.

3. Впервые проведен сравнительный анализ законов релаксации, полу-

ченных в рамках среднеполевой теории и путем численного моделирования, и установлено, что корреляции направлений магнитных моментов наночастиц, обусловленные диполь-дипольным взаимодействием, существенно, а на заключительном этапе релаксации – определяющим образом, влияют на процесс релаксации намагниченности ансамблей наночастиц. Обнаружено, что корреляции ускоряют релаксацию на начальном этапе, замедляют на заключительном и уменьшают абсолютное значение равновесной намагниченности в поле смещения.

Практическое значение полученных результатов

Результаты проведённого в данной работе исследования могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных по изучению свойств двумерных систем однодоменных наночастиц с большой плотностью упаковки, а также для оценки среднего времени бесперебойной работы новых устройств записи и хранения информации. Развитый метод численного моделирования может быть также использован для исследования магнитной релаксации в других системах.

Личный вклад соискателя

Работы [125, 129, 130, 132, 133, 139] выполнены диссертантом в соавторстве. Личный вклад соискателя заключается в выполнении следующего объёма работ: применение метода Крамерса для сведения уравнения Фоккера-Планка к обыкновенному дифференциальному уравнению, которое описывает зависимость намагниченности ансамбля наночастиц от времени во втором разделе, а также численный анализ закона релаксации в третьем разделе статьи [125]; нахождение вероятностей переориентации магнитных моментов наночастиц в зависимости от локальных дипольных полей во втором разделе и разработка алгоритма численного моделирования процесса релаксации намагниченности в третьем разделе статьи [129]; подготовка третьего раздела статьи [130]; получение выражения для плотности вероятности переориентации магнитного момента наночастицы в присутствии поля смещения и численный расчёт закона магнитной релаксации статье

[132]; численный анализ влияния корреляций направлений магнитных моментов на закон релаксации в третьем разделе статьи [133]; численное определение особенностей медленной релаксации намагниченности в статье [139]. Диссертант принимал также непосредственное участие в постановке задач, обсуждении и интерпретации полученных результатов, написании статей.

Апробация результатов диссертации

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

- Тонкие пленки в оптике и электронике. Харьковская научная ассамблея, ISTFE-14 (Харьков, 2002 г.).
- 19th General Conference of the EPS Condensed Matter Division held jointly with CMMP-2002 – Condensed Matter and Materials Physics (Брайтон, Великобритания, 2002 г.).
- Научно-техническая конференция преподавателей, сотрудников и студентов механико-математического факультета СумГУ (Сумы, 2002, 2003, 2004 гг.).
- Новые магнитные материалы микроэлектроники XVIII (Москва, Россия, 2002 г.).
- International Conference on Magnetism (Рим, Италия, 2003 г.).

Публикации

Основные результаты работы опубликованы в 7 статьях общим объемом около 2,7 печатных листа.

РАЗДЕЛ 1

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Изучение свойств нанообъектов является одной из приоритетных задач современной физики. Прежде всего, это связано с бурным развитием нанотехнологий, внедрение которых способно произвести революцию во многих отраслях общественного производства. Среди наиболее перспективных направлений использования нанотехнологий необходимо отметить следующие: создание новых прочных и лёгких конструкционных материалов, которые повысят эффективность и надёжность транспортных средств и коммуникаций; создание новых материалов микроэлектроники, позволяющих создавать сверхбыстрые, малогабаритные и маломощные ЭВМ; создание новых инструментальных средств медицины и принципиально новых фармацевтических препаратов, способных расширить физические возможности человека [1-3].

Возможность создания объектов с характерными размерами в пределах 1-100 нм не следует рассматривать как простое развитие субмикронных технологий или очередной шаг к миниатюризации устройств. В таком масштабе число структурных элементов находится в пределах нескольких тысяч, что обуславливает ряд новых электрических, магнитных и оптических свойств, необычных для макроскопических образцов [3, 4]. Большинство современных теорий твёрдого тела имеют ограничение по минимально допустимым размерам объектов и не в состоянии адекватно описать многообразие новых свойств. Поэтому изучение нанообъектов носит не только прикладной, но и фундаментальный характер.

Для ферромагнетиков определяющим свойством, связанным с малыми размерами образца, является однодоменность или однодоменное состояние [5]. Это значит, что частица ферромагнитного материала не имеет доменного строения, характерного для массивных магнитов. Причиной этого является то, что при уменьшении размеров частицы удельный вес поверхностной энергии

граничных слоев между доменами возрастает, и она становится большей, чем объемная энергия собственного магнитного поля образца [5, 6]. Таким образом, наступает такой момент, когда весь объем образца занимает один домен, т. е. частица превращается в миниатюрный постоянный магнит. На возможность этого явления впервые было указано в работе Френкеля и Дорфмана [7].

Однодоменные ферромагнитные частицы являются достаточно распространенными природными объектами: частицы магнетита (Fe_2O_3) встречаются в вулканических горных породах, в метеоритах, в нервных клетках некоторых животных [8]. Однако создавать их искусственно до недавнего времени было практически невозможно с технической точки зрения. Поэтому объектом теоретического и прикладного интереса были в основном магнитные материалы с мультидоменной структурой [9, 10]. Лишь в последние двадцать лет совершенствование таких методов как литография [11, 12], электронно-лучевая литография [11, 13-16], интерференционная литография [11, 17-20], а также развитие новых методов, таких как туннельно-зондовая литография [11, 21-24], самоупорядоченное формирование регулярных структур [11, 25-27], дали возможность создавать однодоменные частицы с воспроизводимыми характеристиками. Следует также указать на развитые методы измерения магнитных свойств, без которых невозможно экспериментальное изучение малых ферромагнитных частиц и их ансамблей. Это методы на основе магнитооптического эффекта Керра [16, 28-30], СКВИД-магнитометрия [6, 31-34], магнитно-силовая и атомно-силовая микроскопия [21, 22, 29, 35-38], Лоренцева микроскопия [39], мёссбауэровская спектроскопия [40-42].

Значительным стимулом в изучении ансамблей ферромагнитных наночастиц служит широкая перспектива их практического применения. Так, в медицине магнитные частицы используются для создания новых средств диагностики и избирательно направленных лекарственных препаратов [43-45]. В микроэлектронике большие возможности открывает применение однодоменных частиц в качестве элементарных носителей информации. Уже сегодня такое технологическое решение позволяет создавать жёсткие диски со сверхвы-

сокой (до 1 Тбит/дюйм²) плотностью записи [4, 8, 46-54] и модули энерго-независимой оперативной памяти (MRAM) [4, 8, 30] со временем доступа значительно меньшим, чем в стандартных полупроводниковых модулях.

Магнитные свойства ансамблей невзаимодействующих наночастиц полностью определяются их индивидуальными характеристиками, такими как магнитный момент и магнитная анизотропия. Наночастицы с одноосной анизотропией характеризуются внутренним потенциалом, имеющим два разделенных потенциальным барьером локальных минимума, которые отвечают параллельной и антипараллельной ориентации магнитного момента вдоль легкой оси. Согласно Неелю (Néel) [55] при ненулевой температуре магнитный момент преодолевает барьер благодаря тепловым флуктуациям. Динамика ансамбля одинаковых частиц, лёгкие оси которых параллельны друг другу, описывается кинетическим уравнением

$$\dot{n}_1 = -\dot{n}_2 = n_2 v_{21} - n_1 v_{12}, \quad (1.1)$$

где n_1, n_2 – концентрации частиц, магнитные моменты которых ориентированы, соответственно, вдоль и против выбранного направления;
 v_{12}, v_{21} – вероятности изменения ориентации магнитного момента;

$$v_{12} = c_{12} \exp(-\delta U_{12}/k_B T), \quad v_{21} = c_{21} \exp(-\delta U_{21}/k_B T), \quad (1.2)$$

где c_{12}, c_{21} – нормировочные множители;

$\delta U_{12}, \delta U_{21}$ – разности между значением максимума энергии магнитного момента и соответствующими значениями локальных минимумов;

k_B – постоянная Больцмана;

T – абсолютная температура.

Из (1.1) и (1.2) следует, что при условии, что в начальный момент времени все магнитные моменты ориентированы в одном направлении, выражение для намагниченности системы имеет вид

$$M(t) = M_0 \exp(-t/\tau), \quad (1.3)$$

где M_0 – начальная намагниченность ансамбля;

τ – время релаксации, которое обычно записывается в следующем виде

$$\tau = \frac{1}{f_0} \exp\left(-\frac{|\delta U_{12} - \delta U_{21}|}{k_B T}\right), \quad (1.4)$$

где f_0 – характерная частота прецессии магнитного момента, которая определяется параметрами наночастиц.

Выражение (1.4) ещё называют законом Аррениуса-Нееля.

Однако такая простая модель становится непригодной с увеличением температуры и уменьшением объёма частицы, когда предположение о двух разрешённых положениях магнитного момента нарушается.

Математически корректное описание поведения такой системы впервые было дано Брауном (Brown) [56]. Автор исходил из того, что динамика каждого магнитного момента описывается стохастическим уравнением Ландау-Лифшица [57] (в данном случае была использована форма Гильберта)

$$\dot{\mathbf{m}} = \gamma \mathbf{m} \times [\mathbf{H} - \lambda \dot{\mathbf{m}} + \zeta(t)], \quad (1.5)$$

где \mathbf{m} – вектор магнитного момента наночастицы;

γ – гиромагнитное отношение;

$\mathbf{H} = -\partial W / \partial \mathbf{m}$ – эффективное магнитное поле, действующее на магнитный момент;

W – магнитная энергия наночастицы;

λ – параметр затухания;

$\zeta(t)$ – случайное поле, учитывающее тепловые флуктуации магнитного момента.

Поле $\zeta(t)$ аппроксимируется белым шумом с характеристиками $\overline{\zeta(t)} = 0$, $\overline{\zeta(t)\zeta(t+\tau)} \sim \delta(\tau)$, где $\delta(\tau)$ – дельта-функция Дирака, а черта сверху обозначает усреднение по реализациям.

С другой стороны, динамика магнитного момента может быть описана через плотность вероятности нахождения магнитного момента $P = P(t, \theta, \varphi)$ в пределах телесного угла $\sin\theta d\theta d\varphi$. Данная плотность вероятности p подчиняется уравнению Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \psi_i} (A_i P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \psi_i \partial \psi_j} (B_{ij} P), \quad (1.6)$$

где $P = P(t, \psi_1, \psi_2)$, $\psi_1 = \theta$, $\psi_2 = \varphi$;

$$i, j = 1, 2;$$

$$A_i = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta \psi_i \rangle;$$

$$B_{ij} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \Delta \psi_i \Delta \psi_j \rangle.$$

Выражения для коэффициентов A_i и B_{ij} определяются явным видом уравнения (1.5). Существенно упростить задачу позволяет введение осевой симметрии. Если условиться, что составляющие ансамбль частицы являются фигурами вращения и их оси симметрии совпадают с лёгкими осями намагничивания, то плотность вероятности p будет зависеть только от полярного угла θ и времени t . Однако и при этом условии решение уравнения (1.6) представляет сложную задачу, которую автор решает в двух случаях: когда среднее значение высоты потенциального барьера, разделяющего два локальных минимума, мало по сравнению с тепловой энергией (случай низких потенциальных барьеров или суперпарамагнетизм), и когда эта высота в среднем существенно превышает тепловую энергию (случай высоких потенциальных барьеров). Для последнего случая зависимость намагниченности от времени или закон магнитной релаксации имеет вид (1.3).

В настоящее время этот подход широко используется для изучения магнитных свойств ансамблей невзаимодействующих наночастиц [58-62]. Однако ценность работы Брауна состоит не только в математически верной методике описания динамики таких ансамблей, а и в возможности обобщения предло-

женной модели на случай взаимодействия.

Приближение невзаимодействующих наночастиц справедливо, если среднее дипольное магнитное поле, действующее на наночастицу, много меньше поля анизотропии. Если это условие нарушается, тогда кооперативные эффекты, обусловленные дипольным взаимодействием, существенно изменяют магнитные свойства ансамблей наночастиц [63]. Это подтверждается экспериментальными исследованиями влияния взаимодействия на магнитную релаксацию [34, 40, 42, 64-69] комплексную магнитную восприимчивость [40, 69-74], магнитный гистерезис [75-77], температурные свойства ансамблей [34, 67, 69, 78].

Как с практической, так и с теоретической точек зрения большой интерес представляет влияние дипольного взаимодействия на процесс термоиндуцированной релаксации намагниченности. Учет взаимодействия приводит к многочастичной задаче и, следовательно, представляет собой очень сложную проблему. В отсутствие точного решения для описания магнитной релаксации пользуются различными приближёнными методами.

Так, для случая слабовзаимодействующих наночастиц существует ряд теоретических моделей, основанных на предположении о справедливости закона Аррениуса-Нееля (1.3), (1.4). Взаимодействие учитывалось путём введения дополнительного слагаемого в показатель экспоненты в выражении для τ (1.4). Дорманном (Dormann) и др. [65] было предложено положительное значение этого слагаемого. Таким образом, авторы предсказывали рост эффективного потенциального барьера для переориентации магнитного момента, что означало увеличение время релаксации с ростом интенсивности дипольного взаимодействия магнитных моментов частиц. Данный подход позволил объяснить экспериментальные данные по исследованию магнитных свойств трёхмерных систем наночастиц, полученные на то время. Однако впоследствии накопились результаты экспериментов, которые указывали на обратную зависимость времени релаксации от интенсивности взаимодействия [42, 66]. Для объяснения экспериментально наблюдаемого ускорения релаксации, которое было обусловлено

дипольным взаимодействием, Морупом (Mørup) [42] было обосновано альтернативное положение. Здесь слагаемое, содержащее энергию дипольного взаимодействия, вычиталось из потенциального барьера для уединённой частицы.

Критический анализ этих подходов был дан в работе [79], но условия применимости того или иного подхода остались не выясненными. Дополнительное слагаемое различного знака в показателе экспоненты в (1.3) также предлагалось в работе [80], однако критерий выбора знака авторами указан не был. Из сказанного выше следует, что влияние дипольного взаимодействия на магнитную релаксацию в общем случае нельзя учесть через изменение величины эффективного потенциального барьера для переориентации магнитного момента.

На существенность дипольного взаимодействия, а также на непростой характер его влияния на свойства ансамблей однодоменных частиц указывает ряд проведённых численных экспериментов [81-93]. В частности, в работах [91-93] было показано, что взаимодействие может существенно менять временную зависимость намагниченности, а уравнения (1.3) и (1.4) не справедливы для сильно взаимодействующих систем при наличии постоянного внешнего поля. Численные результаты [89, 90] показали важность учёта взаимного расположения наночастиц для описания магнитной релаксации намагниченности из-за возникающих динамических корреляций направлений магнитных моментов, а также указали на различный характер влияния дипольного взаимодействия на различных этапах релаксации.

В двумерных системах с перпендикулярной анизотропией, интерес к которым в последнее время очень велик, дипольное взаимодействие часто учитывалось через введение так называемого размагничивающего поля [96-94], которое вычитается из поля анизотропии. Лоттисом (Lottis) и др. [94] величина этого поля принималась равной $4\pi m(n_1 - n_2)$, то есть фактически в данной модели без достаточных оснований использовалось среднеполевое значение данной характеристики для сплошных плёнок. Не смотря на простоту модели, точное выражение для закона магнитной релаксации получено не было, поскольку ки-

нетическое уравнение (1.1) с учётом размагничивающего поля содержит полином второй степени от $(n_1 - n_2)$ в показателе экспоненты в правых частях (1.2). Решив полученное дифференциальное уравнение численно на некотором конечном интервале, авторы показали, что релаксация из состояния, когда все магнитные моменты имеют одно направление, происходит более медленно, чем это предсказывает закон Аррениуса-Нееля. Далее было предложено аппроксимировать зависимость намагниченности от времени т.н. замедленной экспоненциальной зависимостью (stretched-exponential dependence)

$$M(t) = M_0 \exp\left[-(t/\tau)^\beta\right], \quad 0 < \beta < 1. \quad (1.7)$$

Отметим, что характерное время τ в (1.7) и (1.3) различны. Такая упрощённая версия приближения среднего поля всё же отражает некоторые особенности магнитной релаксации с учётом взаимодействия. Во-первых, рассмотренная модель указывает, что дипольное взаимодействие, по крайней мере, на начальных этапах, ускоряет релаксацию намагниченности. Во-вторых, скорость релаксации падает со временем в силу уменьшения средней величины локальных дипольных полей, что в данной модели описывается через линейное уменьшение размагничивающего поля с намагниченностью.

Дальнейшие усовершенствования такого подхода [95, 96] связаны с попыткой отойти от приближения среднего поля путём введения в выражение для размагничивающего поля дополнительного множителя, определённого на интервале $(0, 1)$. Однако критерий выбора значения указанного множителя предложен не был. Кроме того, выражение (1.7) не имеет место на всех временах, а это значит, что вопрос о поведении магнитной релаксации в ансамблях данного класса остается открытым даже в приближении среднего поля.

Сложности в нахождении точного выражения закона магнитной релаксации стимулирует поиск численного решения задачи. Однако известные методы численного моделирования, которые используются для описания таких систем, в данном случае неприменимы. Так, метод прямого интегрирования системы стохастических уравнений Ландау-Лифшица [90, 97, 98] требует, чтобы вре-

менной шаг был меньше периода прецессии магнитного момента ($\sim 10^{-11}$ с). А это значит, что на современном этапе развития вычислительной техники данный метод применим лишь для описания быстрой релаксации, т.е. релаксации на временах, сравнимых со временем установления квазиравновесного распределения магнитных моментов ($\sim 10^{-8}$ с). Стандартный метод Монте-Карло [71-89, 91-93] в принципе не позволяет моделировать процессы в реальном времени, а, значит, с его помощью невозможно построить временную зависимость намагниченности системы.

Неприменимость стандартных подходов обусловила появление ряда специальных методов для решения данной проблемы. Большинство из них, по сути, являются модификациями стандартных с максимально возможным использованием специфики моделируемых систем для обоснования привязки алгоритма к действительному времени и максимального расширения его области применения. Естественным недостатком такого подхода есть потеря универсальности. Так, поскольку метод Монте-Карло успешно применялся для исследования свойств магнитных систем, были разработаны алгоритмы, в которых шагу Монте-Карло ставится в соответствие конкретный временной интервал.

Первый такой алгоритм был предложен Канаи (Kanai) и Чарапом (Charap) [99]. Его теоретическая основа состоит в следующем. Магнитные моменты всех наночастиц находятся в локальных дипольных полях, следовательно, каждому магнитному моменту соответствует индивидуальное значение величины потенциального барьера переориентации. Среднее время жизни τ_i магнитного момента вдоль направления, соответствующего текущему квазиравновесному состоянию системы, определяется законом Аррениуса-Нееля (1.4). На протяжении некоторого малого по сравнению со средним значением τ_i временного интервала Δt , когда число переориентаций магнитных моментов много меньше общего числа однодоменных частиц в ансамбле N , переориентации полагались статистически независимыми. Согласно теореме умножения вероятностей, вероятность перехода системы в другое квазиравновесное состояние в этом случае

равна $1 - \exp(-\Delta t \cdot Z)$, где $Z = \sum_i^N 1/\tau_i$.

Далее было предложено генерировать случайным образом некоторую вероятность изменения состояния системы ν , которой будет соответствовать промежуток времени $\Delta t = -\ln(\nu)/Z$. Изменения, происходящие за Δt , вносились в систему путём переворота магнитного момента каждой частицы с вероятностью $(1/\tau_i)/Z$ – т.е. постановки численного эксперимента над каждой i -ой частицей по перевороту её магнитного момента с вероятностью положительного исхода $(1/\tau_i)/Z$. Осуществляя циклически вышеописанную процедуру заданное число раз, авторы получали временную эволюцию системы.

Важным моментом описанного алгоритма является то, что в некотором временном интервале взаимодействующую систему можно рассматривать как совокупность невзаимодействующих частиц, находящихся под действием локальных полей, которые неизменны на данном интервале. Однако данный метод имеет два недостатка: во-первых, не учитывается зависимость f_0 от величины поля, действующего на частицу, во вторых, произвольность выбора временного интервала Δt не отражает различие в темпах релаксации на различных временах, указанную в [94]. Эти недостатки затрудняют использование на ранних этапах релаксации, когда локальные дипольные могут сильно различаться, а число переворотов на одном шаге может быть сравнимым с общим числом частиц.

В ходе дальнейших поисков группой авторов [100, 101] был предложен так называемый гибридный метод, который совмещает в себе прямое интегрирование системы стохастических уравнений и метод Монте-Карло. Авторы исходили из того, что поскольку информация о траекториях, по которым магнитные моменты приходят в равновесные положения, не важна, для описания релаксации системы, прецессию каждого магнитного момента можно исключить из рассмотрения. Это достигалось путём использования системы линеаризованных уравнений Ландау-Лифшица, в которой отсутствовали прецессионные слагаемые [102, 103], вместо исходной системы стохастических уравнений.

При этом динамические корреляции направлений магнитных моментов учитывались в множителях перед членами, отвечающими за затухание. Текущие приращения каждого магнитного момента находились с учётом как случайности действия эффективного теплового поля на систему, так и динамических корреляций, и принимались либо нет согласно критериям метода Монте-Карло [104, 105]. Поскольку прецессия всё равно не учитывалась, временной шаг брался на порядок больше характерного времени прецессии. Данный метод позволяет исследовать поведение систем наночастиц на временах до 10^{-3} с [101], а значит, не является универсальным.

Связь между шагом Монте-Карло и конкретным временным интервалом была также предложена в работах [106, 107]. Эта связь устанавливалась исходя из сравнения такой статистической характеристики как дисперсия для вектора магнитного момента, флуктуирующего вокруг положения равновесия, и среднего значения квадрата шага случайных блужданий [105], которыми моделируются тепловые флуктуации вектора \mathbf{m} . Последняя величина фактически задаётся конкретным алгоритмом моделирования.

Предложенный авторами алгоритм является достаточно простым. На каждом шаге для каждого магнитного момента \mathbf{m}_i в плоскости, перпендикулярной к направлению \mathbf{m}_i , в пределах окружности радиуса R_0 с вероятностью $p_{ri} = 3\sqrt{R_0^2 - r_i^2} / 2\pi R_0^2$ генерируется вектор \mathbf{r}_i . Новое положение вектора \mathbf{m}_i находится как $\mathbf{m}_i + \mathbf{r}_i$ и, используя алгоритм термостата [105], принимается с вероятностью $p_a(\Delta E_i) = 1/[1 - \exp(\Delta E_i/k_B T)]$, где ΔE_i – разность энергии конечного и начального положений \mathbf{m}_i . Для малых флуктуаций $\Delta E_i = \Delta E_i(r_i^2)$. Используя вышеуказанные значения вероятностей, находится среднее значение квадрата отклонения вектора \mathbf{m}_i как функция R_0 . Отметим, что данная зависимость одинакова для всех \mathbf{m}_i , так как численная процедура одна и та же для всех магнитных моментов.

Далее авторы используют известную линейную зависимость между дисперсией магнитного момента и временем [108, 109], конкретный вид которой устанавливается из уравнения Ландау-Лифшица (1.5). Сравнивая дисперсию и

среднее значение квадрата отклонения магнитного момента из положения равновесия, была получена следующая зависимость:

$$\Delta t = \frac{R_0^2(1 + \lambda^2)m}{20k_B T \lambda \gamma}, \quad (1.8)$$

которая связывает шаг Монте-Карло с реальным временным интервалом. Как будет показано далее, применение такого метода в настоящей работе затруднительно на данном этапе развития вычислительной техники. К недостаткам описанного метода следует также отнести то, что формула (1.8) получена в так называемом сверхзатухающем пределе: $\lambda > 1$, что не имеет места в реальных системах малых магнитных частиц. Попытки обобщить метод на случай $\lambda < 1$ [110] к настоящему моменту не имеют окончательных результатов.

Из вышесказанного следует, что на современном этапе проблема теоретического описания феномена термоиндуцированной релаксации намагниченности в двумерных ансамблях диполь-дипольным образом взаимодействующих наночастиц с перпендикулярной анизотропией не имеет удовлетворительного решения даже в приближении среднего поля. Численный анализ магнитной релаксации в таких системах затруднён в силу отсутствия эффективных алгоритмов, адекватно отражающих временную эволюцию намагниченности. Недостатки в существующих подходах не позволяют провести всестороннее изучение данного феномена. В частности, не выясненным остаётся важное с практической точки зрения влияние на магнитную релаксацию внешнего поля типа решётки, в которой размещены наночастицы, размерных эффектов или эффектов конечности образца.

Таким образом, цель настоящей работы формулируется как получение закона магнитной релаксации для двумерных ансамблей одноосных наночастиц с перпендикулярной анизотропией, взаимодействующих посредством дипольного взаимодействия. Поставленная цель была достигнута путём выполнения следующих этапов исследовательской работы.

1. Построение теории магнитной релаксации в двумерных системах

взаимодействующих наночастиц в приближении среднего дипольного поля.

2. Создание физически обоснованного алгоритма численного моделирования релаксации намагниченности для систем данного класса, который позволит исследовать влияние динамических корреляций направлений магнитных моментов ферромагнитных наночастиц и конкретных характеристик ансамбля на закон магнитной релаксации.
3. Получение закона магнитной релаксации для различных значений величины внешнего поля, различных типов решётки и различных граничных условий, анализ полученных зависимостей. Сравнение результатов среднеполевой теории и численного моделирования.

РАЗДЕЛ 2

СРЕДНЕПОЛЕВАЯ ТЕОРИЯ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

2.1. Обоснование модели и метода исследования

С практической точки зрения огромный интерес имеет класс двумерных ансамблей одноосных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией – т.е. ансамблей, в которых легкие оси всех частиц перпендикулярны плоскости их распределения, а среднее значение потенциального барьера для переориентации магнитного момента существенно превышает тепловую энергию. Композитные материалы, представляющие собой такую систему, внедрённую в непроводящую немагнитную твёрдую матрицу, составляют основу сверхновых запоминающих устройств с перпендикулярной записью [46]. В обычных магнитных накопителях, в которых запись производится на сплошную плёнку, а магнитный момент каждого домена лежит в плоскости плёнки, предельная плотность записи составляет величину порядка 10 Гбит/дюйм² [111], в то время как перпендикулярная запись на упорядоченную композитную структуру на сегодня позволяет достичь плотностью записи до 1 Тбит/дюйм² [4,8,46-54].

Создание упорядоченных структур такого плана является чрезвычайно сложной технической задачей. Только в последние несколько лет появились технологии, обеспечивающие необходимую точность позиционирования наночастиц ферромагнетика на подложке. В качестве примера на рисунке 2.1 показаны сделанные с помощью растрового электронного микроскопа снимки упорядоченных ансамблей наночастиц. Оба ансамбля получены методом электронно-лучевой литографии. На рис. 2.1 а) показан участок прямоугольной решётки наночастиц, имеющих форму дисков диаметром 60 нм. Постоянные решётки соответственно равны 110 нм и 180 нм. Магнитные моменты наночастиц расположены в плоскости размещения. Для обеспечения перпендикулярной анизотропии обычно создают сложную мультислойную структуру из

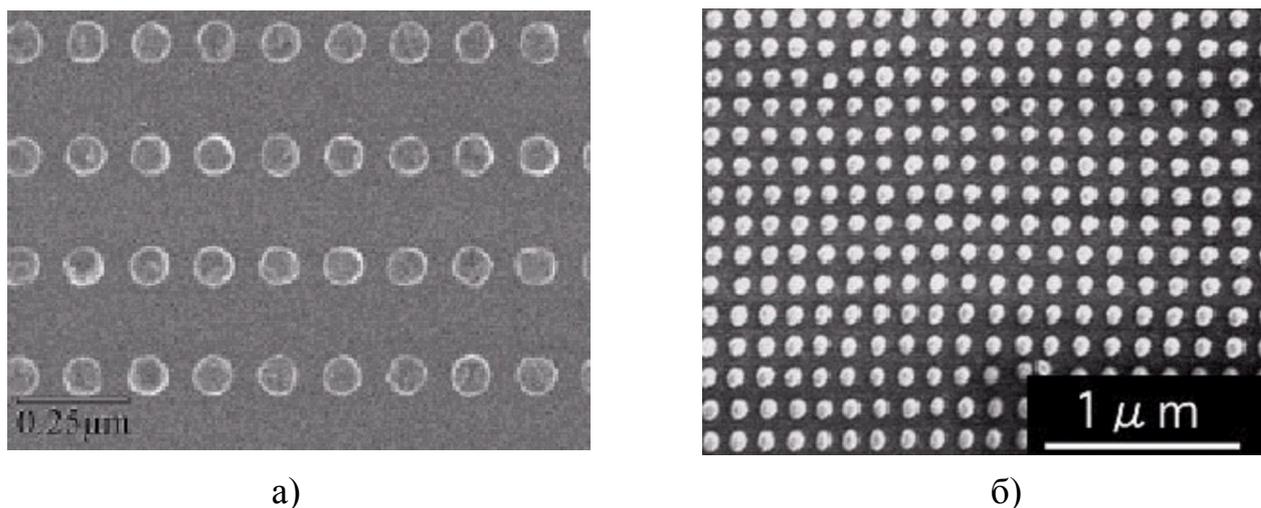


Рис. 2.1. Снимки упорядоченных композитных структур: а) ансамбль наночастиц супермаллоя ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{14}\text{Mo}_5$), полученный в [15]; б) ансамбль наночастиц трёхслойной структуры CoCrPt , полученный в [112].

кобальта, хрома и платины (CoCrPt). На рис. 2.1 б) изображён участок квадратной решётки наночастиц CoCrPt диаметром 80 нм и высотой 44 нм, период решётки – 150 нм. Магнитные моменты наночастиц перпендикулярны плоскости рисунка.

Направления магнитных моментов, которыми характеризуются наночастицы, в каждый момент времени в общем случае зависят от внешнего поля, магнитной анизотропии частицы и температуры. Под действием внешнего поля и тепловой активации при достаточно больших температурах, или в результате квантового туннелирования при низких температурах, магнитные моменты претерпевают переориентацию. Таким образом, происходит перемагничивание наночастицы.

Классические подходы к описанию процесс перемагничивания наночастиц разделяют на однородные и неоднородные. Неоднородные процессы имеют место для достаточно больших однодоменных частиц (~ 100 нм). Если размер наночастицы значительно превышает характерный размер доменной границы, то энергетически выгодным является перемагничивание посредством

образования, движения и исчезновения доменных границ [6]. Это сложный процесс, который характеризуется специфической формой петли гистерезиса с обратимой её частью в центре. Более простым видом неоднородного перемангничивания является образование так называемых вихрей – замкнутых линий, вдоль касательных к которым располагаются спины [6, 113]. Условием возникновения такого пространственного расположения спинов, является превышение размеров наночастицы характерной длины обменного взаимодействия.

Среди однородных моделей перемангничивания наиболее простой есть модель когерентного вращения, разработанная Стонером (Stoner) и Волфартом (Wohlfarth) в 1948 году [114]. Согласно ей, в любой момент времени все спины параллельны друг другу, а значит, совокупности спинов наночастицы всегда можно ставить в соответствие определённый магнитный момент. Не смотря на простоту, такой подход с достаточной степенью точности описывает процесс перемангничивания. Так, в работах [115, 116] было показано, что петли гистерезиса наночастиц Co и BaFeO величиной $70 \times 50 \times 25 \text{ нм}^3$, полученных экспериментально и в рамках модели когерентного вращения, практически совпадают.

Первоначально положение о когерентном вращении предполагало наличие только магнитной анизотропии формы. В реальных ферромагнитных наночастицах, существуют ещё несколько типов анизотропии – а именно: магнитоупругая, магнитокристаллическая и поверхностная анизотропия [6, 113]. В общем случае их оси могут иметь произвольные направления. Однако часто бывает, что один вид анизотропии является доминирующим. Так, например, в вышеуказанных работах [115, 116] доминирующей являлась одноосная магнитокристаллическая анизотропия.

Как было сказано ранее, при достаточно больших температурах, значительная роль в процессе перемангничивания принадлежит тепловой активации. Наличие анизотропии обуславливает энергетический барьер для переориентации магнитного момента, который может быть преодолен за счёт тепловой энергии $k_B T$. В случае, когда эта энергия превышает или сравнима с энергией анизотропии, имеет место явление суперпарамагнетизма, заключающееся в том,

что магнитные моменты наночастиц не имеют преимущественного направления, и ведут себя подобно магнитным моментам парамагнитных атомов [6, 56]. Если потенциальный барьер существенно превышает $k_B T$, а перемагничивание происходит путём когерентного вращения, динамика магнитного момента описывается в рамках подхода Нееля-Брауна, изложенного в предыдущем разделе. Справедливость этой модели для уединённых наночастиц подтверждена экспериментально в работах [115, 116].

Если абсолютная температура стремиться к нулю и вероятность преодоления потенциального барьера за счёт тепловой энергии $k_B T$ очень мала, перемагничивание наночастицы может происходить за счёт эффекта макроскопического квантового туннелирования [117]. Особенность этого явления заключается в том, что практически всё время наблюдения магнитный момент наночастицы может рассматриваться как классический, и лишь на малом промежутке времени работают квантовые механизмы, благодаря которым происходит перемагничивание.

Важнейшей характеристикой ансамбля есть намагниченность, которая определяется как индивидуальными параметрами наночастиц, составляющих ансамбль, так и характером их взаимодействия. В системах ферромагнитных наночастиц возможны следующие виды взаимодействия [118, 119]. 1. Диполь-дипольное или магнитостатическое взаимодействие, которое присутствует в любых магнитных системах и часто является одним из определяющих магнитные свойства. 2. Обменное взаимодействие [120] спинов, принадлежащих разным наночастицам, которое осуществляется через поверхности частиц при контакте. В отсутствие непосредственного контакта, такое взаимодействие пренебрежимо мало. 3. Взаимодействие Рудемана-Киттеля, которое осуществляется через электроны проводимости матрицы в случае, если матрица проводящая. 4. Сверхобменное взаимодействие, имеющее место в ансамблях частиц, расположенных в непроводящей матрице. 6. Магнитострикционное взаимодействие, которое связано с наличием механических напряжений в матрице.

В ансамблях наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией,

внедрённых в немагнитную непроводящую матрицу в отсутствие механических напряжений, присутствует только два из шести перечисленных вида взаимодействия: диполь-дипольное и сверхобменное. Как правило, степень влияния последнего пренебрежимо мала по сравнению с первым. Поэтому дальнейшие рассуждения построены в предположении, что взаимодействие в рассматриваемой системе осуществляется только диполь-дипольным образом. Анализ, проведённый в предыдущем разделе, показывает, что дипольное взаимодействие может оказывать существенное влияние на динамику магнитных моментов наночастиц, а, значит, временная зависимость намагниченности будет в значительной степени определяться данным взаимодействием.

Для выяснения основных особенностей динамики намагниченности ансамбля взаимодействующих частиц, большую роль играет решение задачи о термоиндуцированной магнитной релаксации из состояния, когда все магнитные моменты сонаправлены. Вопрос о релаксации также важен с точки зрения оценки надёжности устройств с перпендикулярной записью.

Чтобы описать динамику каждого магнитного момента, предлагается использовать модель Нееля-Брауна, основанную на предположении о когерентном вращении магнитных моментов наночастиц, в которой перемагничивание происходит за счёт тепловой активации. Этот подход обладает достаточной математической строгостью, и его результаты для случая невзаимодействующих частиц имеют экспериментальные подтверждения.

В рамках такой модели, динамика магнитного момента наночастицы, согласно уравнению Ландау-Лифшица [57], определяется эффективным магнитным полем, в котором находится эта частица. Эффективное поле здесь представляет собой сумму поля анизотропии и локальных дипольных полей. Таким образом, введение дипольного взаимодействия не вносит принципиальных изменений в выбранный метод исследования и результаты, полученные с его помощью, будут справедливыми, как и в случае невзаимодействующих частиц. Поскольку модуль каждого магнитного момента полагается неизменным, релаксационное слагаемое выбирается в наиболее простом виде, без учёта обмен-

ной составляющей [121-123], отвечающей за изменение величины намагниченности наночастицы.

Поскольку локальные дипольные поля в местах расположения наночастиц будут определяться магнитными моментами окружения, то учет взаимодействия приводит к многочастичной задаче, аналитически решить которую практически невозможно. Поэтому целесообразно, особенно на первой стадии изучения феномена магнитной релаксации, пользоваться приближением среднего поля, в котором локальные дипольные поля заменяются усреднённым по ансамблю значением, пропорциональным намагниченности ансамбля [124]. Напомним, что подобный приём был проделан в работе [94] и позволил сделать ряд важных выводов о характере релаксации. Однако приближение среднего поля здесь было использовано некорректно, без соответствующих процедур усреднения и самосогласования.

В данном разделе в рамках приближения среднего локального дипольного поля с использованием математического аппарата марковских процессов получено дифференциальное уравнение, решением которого является зависимость приведенной намагниченности ансамбля от времени в случае высоких потенциальных барьеров. Были найдены асимптотические решения этого уравнения, а сам закон магнитной релаксации был аппроксимирован выражением, полученным с помощью асимптотик [125]. Предложенная модель была обобщена на случай ненулевого внешнего поля. Выявлены качественные различия законов магнитной релаксации ансамбля во внешнем поле и в его отсутствие.

2.2. Модель и основные соотношения

Согласно предложенной модели, двумерный ансамбль магнитных частиц представляется в виде квадратной решётки периода d , лежащей в плоскости xu , и в узлах которой расположены одноосные сферические наночастицы (см. рис. 2.2). Чтобы учесть нерегулярность, которая часто имеет место в реальных сис-

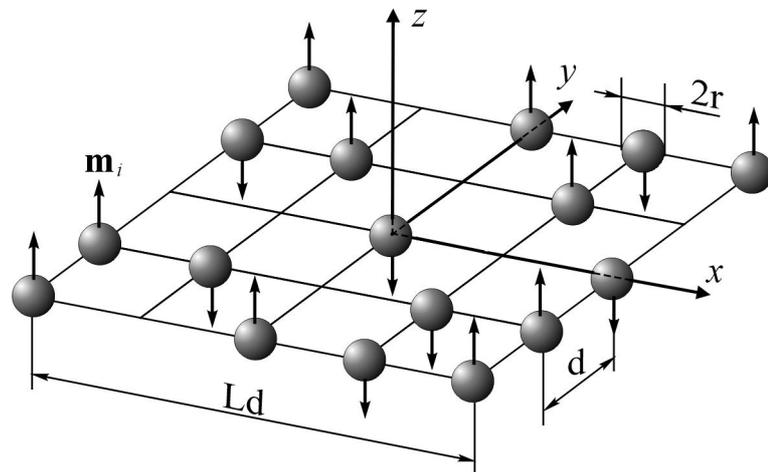


Рис. 2.2. Схематическое представление модели.

темах, полагается, что каждая частица занимает узел решётки с вероятностью p . Лёгкие оси наночастиц перпендикулярны плоскости их распределения. В силу сферической симметрии, модули магнитных моментов \mathbf{m}_i частиц равны между собой (индекс i нумерует наночастицы), а различны лишь их направления. Динамика магнитных моментов $\mathbf{m}_i = \mathbf{m}_i(t)$ описывается системой стохастических уравнений Ландау-Лифшица

$$\dot{\mathbf{m}}_i = -\gamma \mathbf{m}_i \times [\mathbf{H}_i + \zeta_i(t)] - (\lambda\gamma/m) \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{H}_i = -\partial W/\partial \mathbf{m}_i$ – эффективное магнитное поле, действующее на \mathbf{m}_i ;

W – магнитная энергия ансамбля наночастиц;

$\zeta_i(t)$ – случайное тепловое поле, учитывающее тепловые флуктуации магнитного момента.

Согласно формуле Найквиста, шум может быть представлен как белый вплоть до частоты порядка $k_B T/\hbar$, где \hbar – постоянная Планка (т.е. $\sim 10^{-13} \text{ с}^{-1}$ для комнатной температуры) Как было указано в работе Брауна [56], время реакции магнитного момента наночастицы обратнопропорционально частоте магнитного резонанса ($\sim 10^{-10} \text{ с}^{-1}$); таким образом, случайное поле $\zeta_i(t)$ может быть представлено белым шумом с характеристиками:

$$\overline{\zeta_i(t)} = 0, \quad \overline{\zeta_{i\alpha}(t)\zeta_{j\beta}(t+\tau)} = 2\Delta\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\delta(\tau), \quad (2.2)$$

где $\zeta_{i\alpha}(t)$ ($\alpha = x, y, z$) – компоненты вектора $\zeta_i(t)$;

Δ – интенсивность шума;

δ_{ij} – символ Кронекера;

$\delta(\tau)$ – дельта-функция Дирака,

а черта сверху обозначает усреднение по реализациям.

Поскольку магнитные моменты m_i являются сохраняющимися величинами, их динамику мы можем описывать системой стохастических уравнений для полярных $\psi_{i1} = \psi_{i1}(t)$ ($0 \leq \psi_{i1} \leq \pi$) и азимутальных $\psi_{i2} = \psi_{i2}(t)$ ($0 \leq \psi_{i2} \leq 2\pi$) углов m_i . Для этого представим (2.1) в сферической системе координат. Выражение $\partial W / \partial \mathbf{m}_i$ представляет собой градиент функции W по вектору \mathbf{m}_i и в сферических координатах запишется как (далее индекс i опущен)

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{m}} = \mathbf{e}_\theta \frac{1}{m} \frac{\partial W}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{m \sin \theta} \frac{\partial W}{\partial \varphi}, \quad (2.3)$$

где $\mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi$ – орты сферической системы координат;

θ, φ – соответственно полярный и азимутальный угол выбранной наночастицы ($\theta \equiv \psi_{i1}$ $\varphi \equiv \psi_{i2}$).

Здесь учтено, что \mathbf{m} по модулю константа. Производная по времени имеет вид

$$\dot{\mathbf{m}} = \mathbf{e}_x \left(\frac{\partial m_x}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial m_x}{\partial \varphi} \dot{\varphi} \right) + \mathbf{e}_y \left(\frac{\partial m_y}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial m_y}{\partial \varphi} \dot{\varphi} \right) + \mathbf{e}_z \left(\frac{\partial m_z}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial m_z}{\partial \varphi} \dot{\varphi} \right), \quad (2.4)$$

где $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – орты декартовой системы координат.

Используя выражения для декартовых компонент вектора \mathbf{m}_i через сферические координаты, а также выражения для ортов сферической системы координат через орты декартовой, выражение (2.4) преобразуется к виду

$$\dot{\mathbf{m}} = \mathbf{e}_\theta m \dot{\theta} + \mathbf{e}_\varphi m \sin \theta \dot{\varphi} \quad (2.5)$$

При вычислении векторных произведений необходимо учесть, что вектор \mathbf{m} в сферических координатах имеет только одну ненулевую компоненту –

$m_r = m$. В результате уравнение (2.1) запишется как

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\theta m \dot{\theta} + \mathbf{e}_\varphi m \sin \theta \dot{\varphi} = & -\mathbf{e}_\theta \gamma \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial W}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_\varphi \gamma \frac{\partial W}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\theta \gamma \zeta_\varphi(t) m - \mathbf{e}_\varphi \gamma \zeta_\theta(t) m - \\ & - \mathbf{e}_\theta \lambda \gamma \frac{\partial W}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\varphi \lambda \gamma \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial W}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Здесь

$$\zeta_\varphi(t) = -\zeta_x(t) \sin \varphi + \zeta_y(t) \cos \varphi = \frac{1}{m \sin \theta} \frac{\partial m_\alpha}{\partial \varphi} \zeta_\alpha(t), \quad (2.7)$$

$$\zeta_\theta(t) = \zeta_x(t) \cos \theta \cos \varphi + \zeta_y(t) \cos \theta \sin \varphi + \zeta_z(t) \sin \theta = \frac{1}{m} \frac{\partial m_\alpha}{\partial \theta} \zeta_\alpha(t), \quad (2.8)$$

где α – немой индекс ($\alpha = x, y, z$).

Векторное уравнение (2.6) можно представить системой двух скалярных уравнений

$$\begin{cases} \dot{\theta} = -\frac{\gamma}{m \sin \theta} \left(\lambda \sin \theta \frac{\partial W}{\partial \theta} + \frac{\partial W}{\partial \varphi} \right) + \gamma \zeta_\varphi(t) \\ \dot{\varphi} = \frac{\gamma}{m \sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial W}{\partial \theta} - \lambda \frac{\partial W}{\partial \varphi} \right) - \frac{\gamma \zeta_\theta(t)}{\sin \theta} \end{cases} \quad (2.9)$$

С учётом (2.9) уравнение (2.1) имеет вид

$$\dot{\psi}_{ik} = f_k \{ \psi \} + g_{k\alpha}(\psi_{i1}, \psi_{i2}) \zeta_{i\alpha}(t), \quad (k = 1, 2). \quad (2.10)$$

Здесь и далее по дважды повторяющимся индексам, не нумерующим начастичицы, предполагается суммирование. Функции $g_{k\alpha}(\psi_{i1}, \psi_{i2})$ и $f_k \{ \psi \}$ (ψ в фигурных скобках обозначает совокупность полярных и азимутальных углов магнитных моментов в ансамбле), которые мы будем записывать как $g_{k\alpha}$ и f_k , соответственно, определяются следующим образом:

$$g_{1\alpha} = \frac{\gamma}{m \sin \psi_{i1}} \frac{\partial m_{i\alpha}}{\partial \psi_{i2}}, \quad g_{2\alpha} = -\frac{\gamma}{m \sin \psi_{i1}} \frac{\partial m_{i\alpha}}{\partial \psi_{i1}}, \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned}
f_1 &= -\frac{\gamma}{m \sin \psi_{i1}} \left[\lambda \sin \psi_{i1} \frac{\partial}{\partial \psi_{i1}} + \frac{\partial}{\partial \psi_{i2}} \right] W, \\
f_2 &= \frac{\gamma}{m \sin^2 \psi_{i1}} \left[\sin \psi_{i1} \frac{\partial}{\partial \psi_{i1}} - \lambda \frac{\partial}{\partial \psi_{i2}} \right] W.
\end{aligned}
\tag{2.12}$$

В отсутствии внешнего поля магнитная энергия системы W представляет собой сумму энергии анизотропии и энергии диполь-дипольного взаимодействия магнитных моментов частиц:

$$W = -\frac{\beta}{2V} \sum_i (\mathbf{m}_i \mathbf{e}_z)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j) r_{ij}^2 - 3(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5},
\tag{2.13}$$

где β – константа анизотропии;

V – объем частицы;

\mathbf{r}_{ij} – радиус-вектор, проведённый из центра i -ой наночастицы в центр j -ой.

Таким образом, мы пришли к стохастическому дифференциальному уравнению с мультипликативным шумом.

Динамику ансамбля можно также описать через плотность вероятности нахождения системы в том или ином состоянии, учитывая, что в данном случае это будет совместная плотность вероятности по всем магнитным моментам. Эта плотность вероятности будет удовлетворять уравнению Фоккера-Планка, которое в общем виде записывается как (1.6). Поскольку как (1.6), так и (2.10) описывают один и тот же процесс, между ними должно быть однозначное соответствие. Сложность при установлении указанного соответствия состоит в том, что уравнения (2.10) содержат белый шум, который не входит в класс функций, рассматриваемых классическим анализом. Поэтому, чтобы найти вид уравнения Фоккера-Планка, уравнения (2.10) представим в виде разностной схемы (А.1) (см. Приложение А). Исходя из соображений, что в данной задаче шум всё же не является белым и имеет конечное время корреляции, значение χ следует брать равным 0.5, что соответствует исчислению Стратоновича

[108,109,126]. Перепишем (А.10) в виде

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum \frac{\partial}{\partial \psi_{ik}} \left[- \left(f_k + \Delta g_{h\alpha} \frac{\partial g_{h\alpha}}{\partial \psi_{ih}} \right) P + \Delta \frac{\partial}{\partial \psi_{ih}} (g_{h\alpha} g_{k\alpha} P) \right]. \quad (2.14)$$

Решение этого уравнения должно удовлетворять условию нормировки

$$\int P(\{\psi\}, t) \prod_i d\psi_{i1} d\psi_{i2} = 1 \quad (2.15)$$

и начальному условию, которое при $\mathbf{m}_i(0) = m\mathbf{e}_z$ имеет вид

$$P(\{\psi\}, 0) = \prod_i \frac{1}{2\pi} \delta(\psi_{i1}). \quad (2.16)$$

Принимая во внимание, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{i1}}{\partial \psi_{i1}} &= m \cos \psi_{i1} \cos \psi_{i2}, & \frac{\partial m_{i1}}{\partial \psi_{i2}} &= -m \sin \psi_{i1} \sin \psi_{i2}, \\ \frac{\partial m_{i2}}{\partial \psi_{i1}} &= m \cos \psi_{i1} \sin \psi_{i2}, & \frac{\partial m_{i2}}{\partial \psi_{i2}} &= m \sin \psi_{i1} \cos \psi_{i2}, \\ \frac{\partial m_{i3}}{\partial \psi_{i1}} &= -m \sin \psi_{i1}, & \frac{\partial m_{i3}}{\partial \psi_{i2}} &= 0, \end{aligned}$$

и, соответственно,

$$\begin{aligned} g_{11}^2 &= \gamma^2 \cos^2 \psi_{i2}, & g_{11}g_{21} &= \gamma^2 \cot \psi_{i1} \cos^2 \psi_{i2}, & g_{21}^2 &= \gamma^2 \cot^2 \psi_{i1} \cos^2 \psi_{i2}, \\ g_{12}^2 &= \gamma^2 \cos^2 \psi_{i2}, & g_{12}g_{22} &= -\gamma^2 \cot \psi_{i1} \sin \psi_{i2} \cos \psi_{i2}, & g_{22}^2 &= -\gamma^2 \cot^2 \psi_{i1} \sin^2 \psi_{i2}, \\ g_{13}^2 &= 0, & g_{23}^2 &= \gamma^2, & g_{13}g_{23} &= 0, \end{aligned}$$

получаем

$$g_{h\alpha} \frac{\partial g_{k\alpha}}{\partial \psi_{ih}} = \delta_{k1} \gamma^2 \cot \psi_{i1}, \quad g_{h\alpha} g_{k\alpha} = \gamma^2 (\delta_{k1} \delta_{k1} + \delta_{k1} \delta_{k1} \sin^{-2} \psi_{i1}). \quad (2.17)$$

Чтобы определить интенсивность шума, найдём стационарное решение

(2.14). Пусть решение имеет вид

$$P_S(\{\psi_{i1}\}) = C \exp(-AW) \prod_i \sin \psi_{i1}, \quad (2.18)$$

где C – нормировочный множитель;

A – постоянная, подлежащая определению.

Подставим (2.18) в выражение (2.14) и после соответствующих преобразований получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \psi_{i1}} \left[\left(\lambda \frac{\partial W}{\partial \psi_{i1}} \sin \psi_{i1} + \frac{\partial W}{\partial \psi_{i2}} + \Delta \gamma m A \frac{\partial W}{\partial \psi_{i1}} \sin \psi_{i1} \right) e^{AW} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \psi_{i2}} \left[\left(\lambda \frac{\partial W}{\partial \psi_{i2}} \sin^{-1} \psi_{i1} - \frac{\partial W}{\partial \psi_{i2}} + \Delta \gamma m A \frac{\partial W}{\partial \psi_{i2}} \sin^{-1} \psi_{i1} \right) e^{AW} \right] = 0. \end{aligned}$$

Последнее уравнение обращается в тождество при условии, что $A = -\lambda/\Delta\gamma m$. В соответствии с этим (2.18) перейдет к виду

$$P_S(\{\psi_{i1}\}) = C \exp(-\lambda W / \Delta\gamma m) \prod_i \sin \psi_{i1}.$$

Сравнив это выражение с распределением Больцмана, находим интенсивность теплового поля

$$\Delta = \lambda k_B T / \gamma m. \quad (2.19)$$

С помощью совместной функции распределения P среднюю величину $\overline{m_z(t)} = \langle \overline{m_{jz}(t)} \rangle$ z -й компоненты магнитного момента наночастицы можно представить в виде

$$\overline{m_z(t)} = m \int \cos \psi_{j1} \langle P(\{\psi\}, t) \rangle \prod d\psi_{i1} \psi_{i2}. \quad (2.20)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по возможным положениям наночастиц в решетке, которые предполагаются равновероятными. В (2.20) выбор наночастицы с номером j является произвольным, поэтому для удобства мы

рассмотрим наночастицу в начале координат и припишем ей номер $j = 0$. Тогда, воспользовавшись обозначениями $\psi_{01} = \psi_1$ и $\psi_{02} = \psi_2$, из (2.20) получаем

$$\overline{m_z(t)} = m \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \cos \psi_1 P_0(\psi_1, \psi_2, t) d\psi_1 d\psi_2, \quad (2.21)$$

где

$$P_0(\psi_1, \psi_2, t) = \int \langle P(\{\psi\}, t) \rangle \prod_{i \neq 0} d\psi_{i1} \psi_{i2} \quad (2.22)$$

– функция распределения выделенной наночастицы.

2.3. Закон магнитной релаксации

Поскольку вычисление функции распределения $P_0 = P_0(\psi_1, \psi_2, t)$ по точной формуле (2.22) невозможно, найдем уравнение для P_0 в приближении среднего дипольного поля. В рамках этого приближения дипольное магнитное поле

$$\mathbf{h}_i(t) = \sum_{i \neq 0} \frac{3\mathbf{r}_i(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_i) - r_i^2 \mathbf{m}_i}{r_i^5}, \quad (2.23)$$

действующее на расположенный в начале координат магнитный момент $\mathbf{m} = \mathbf{m}_0(t)$, заменяется своим средним значением $\mathbf{H}(t) = \langle \mathbf{h}(t) \rangle$. Тогда систему стохастических уравнений (2.10) для полярного $\psi_1 = \psi_1(t)$ и азимутального $\psi_2 = \psi_2(t)$ углов магнитного момента \mathbf{m} мы можем записать в виде

$$\dot{\psi}_k = f_k(\psi_1, \psi_2, t) + g_{k\alpha}(\psi_1, \psi_2) \zeta_\alpha(t) \quad (k = 1, 2). \quad (2.24)$$

Здесь функции $g_{k\alpha} = g_{k\alpha}(\psi_1, \psi_2)$ и $f_k = f_k(\psi_1, \psi_2, t)$ даются выражениями (2.11), в которых индекс i следует опустить, а W следует заменить на

$$W_0 = -(H_a/2m)m_z^2 - \mathbf{mH}(t), \quad (2.25)$$

где W_0 – магнитная энергия наночастицы в приближении среднего поля;

$$H_a = \beta m/V - \text{поле анизотропии.}$$

Уравнение для функции распределения P_0 , отвечающее уравнению (2.24), может быть преобразовано к виду

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left[- \left(f_k + \Delta \frac{\partial g_{k\alpha}}{\partial \psi_h} g_{h\alpha} \right) P_0 + \Delta \frac{\partial}{\partial \psi_h} (g_{k\alpha} g_{h\alpha} P_0) \right]. \quad (2.26)$$

Следует отметить, что, несмотря на внешнее сходство, уравнения (2.14) и (2.26) имеют принципиальное отличие: в то время как уравнение (2.14) полностью определено, уравнение (2.26) содержит неизвестную функцию $\mathbf{H}(t)$. Это означает, что уравнение (2.26) не замкнуто относительно функции распределения P_0 .

Для замыкания этого уравнения выразим сначала $\mathbf{H}(t)$ через P_0 . Из вида граничного условия (2.16) и условия равновероятности распределений наночастиц по узлам решетки можно заключить, что $\mathbf{H}(t) = H(t)\mathbf{e}_z$, где

$$H(t) = - \left\langle \sum_{i \neq 0} \frac{\overline{m_{iz}(t)}}{r_i^3} \right\rangle. \quad (2.27)$$

Чтобы выполнить усреднение в (2.27), рассмотрим область решетки размера $L \times L$, содержащую S узлов. Число перестановок $N - 1$ неразличимых частиц по $S - 1$ узлам решетки (напомним, узел $\mathbf{s} = 0$ занят наночастицей) равно $R = (S - 1)!/(N - 1)!(S - N)!$. А число перестановок, в которых два узла $\mathbf{s} = 0$ и $\mathbf{s} = d(n_1\mathbf{e}_x + n_2\mathbf{e}_y)$ заняты наночастицами, равно $R_1 = R(N - 1)/(S - 1)$. Пронумеруем последние перестановки индексом l и обозначим z -компоненту магнитного момента в узле \mathbf{s} как $\overline{m_{sz}^{(l)}(t)}$. Тогда, поскольку вероятность каждой перестановки равна $1/R$, мы можем выражение (2.27) представить в виде

$$H(t) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{R_1}{R} \sum_{\mathbf{s}} \frac{1}{|\mathbf{s}|^3} \left(\frac{1}{R_1} \sum_{l=1}^{R_1} \overline{m_{sz}^{(l)}(t)} \right). \quad (2.28)$$

Принимая во внимание, что при $L \rightarrow \infty$, отношение R_1/R стремится к p ,

убеждаемся, что выражение в скобках в правой части в (2.28) стремится к $\overline{m_z(t)}$. Поэтому, определив решеточную сумму

$$S_1 = \frac{1}{8} \sum_{n_1, n_2} \frac{1}{(n_1^2 + n_2^2)^{3/2}} \approx 1.1291, \quad (2.29)$$

из (2.28) получаем

$$H(t) = -8pS_1 \overline{m_z(t)} / d^3. \quad (2.30)$$

Выражения (2.21) и (2.30) устанавливают искомую связь между $H(t)$ и P_0 .

Запишем уравнение (2.26) в развёрнутом виде с учётом (2.11), (2.12) и (2.17)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_0}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial \psi_1} \left(\frac{\lambda \gamma}{m} \frac{dW_0}{d\psi_1} - \gamma^2 \Delta \cot \psi_1 \right) P_0 + \gamma^2 \Delta \frac{\partial^2 P_0}{\partial \psi_1^2} - \\ & - \frac{\gamma}{m \sin \psi_1} \frac{dW_0}{d\psi_1} \frac{\partial P_0}{\partial \psi_2} + \gamma^2 \Delta (1 + \cot^2 \psi_1) \frac{\partial^2 P_0}{\partial \psi_2^2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

В рамках рассматриваемой модели энергия W_0 не зависит от азимутального угла, поэтому все слагаемые, содержащие производные $\partial W_0 / \partial \psi_2$, в (2.31) положены равными нулю. Так как начальные условия для функции распределения также не зависят от ψ_2 , представим P_0 в виде $P_0 = Q(\psi_1, t) / 2\pi$. Функция распределения $Q = Q(\psi_1, t) = Q(\theta, t)$ подчиняется начальному условию $Q(\theta, t) = \delta(\theta)$ и, согласно (2.31), удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left[- \left(\frac{\lambda \gamma}{m} \frac{dW_0}{d\theta} + \Delta \gamma^2 \cot \theta \right) Q + \Delta \gamma^2 \frac{\partial^2 Q}{\partial \theta^2} \right],$$

расписав которое с учётом (2.13), получим

$$\frac{\partial Q(\theta, t)}{\partial t} = \frac{1}{t_r a} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ [a(\sin 2\theta + 2b(t)\sin \theta) - \cot \theta] Q(\theta, t) + \frac{\partial Q(\theta, t)}{\partial \theta} \right\}, \quad (2.32)$$

где $t_r = 2/\lambda\gamma H_a$;

$$a = H_a m / 2k_B T;$$

$$b(t) = H(t) / H_a.$$

Определим функцию распределения $Q_{qe}(\theta, t)$ следующим образом

$$Q_{qe}(\theta, t) = C(t) \sin \theta \exp[a(\cos^2 \theta + 2b(t)\cos \theta)], \quad (2.33)$$

где $C(t)$ – нормировочный множитель, который удовлетворяет уравнению

$$[a(\sin 2\theta + 2b(t)\sin \theta) - \cot \theta] Q_{qe}(\theta, t) + \frac{\partial Q_{qe}(\theta, t)}{\partial \theta} = 0. \quad (2.34)$$

Функция $Q_{qe}(\theta, t)$ при $t > t_{qe} \sim t_r a$ описывает квазиравновесное (при $t \rightarrow \infty$ – равновесное) распределение магнитного момента \mathbf{m} . Здесь t_{qe} – время установления квазиравновесного состояния системы. Под квазиравновесным состоянием следует понимать любое состояние, при котором все магнитные моменты ориентированы вдоль или против оси z . Используя уравнение (2.34), мы можем представить (2.32) в виде

$$\frac{\partial Q(\theta, t)}{\partial t} = \frac{1}{t_r a(t)} \frac{\partial}{\partial \theta} \tilde{Q}_{qe}(\theta, t) \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{Q(\theta, t)}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)}, \quad (2.35)$$

где $\tilde{Q}_{qe}(\theta, t) = Q_{qe}(\theta, t) / C(t)$.

Будем считать, что релаксация магнитного момента к состоянию с наименьшей энергией – т.е. к положению, при котором он направлен параллельно оси z – мало по сравнению со временем наблюдения или $t \gg t_{qe}$. Тогда функция распределения направлений магнитного момента в пределах каждой потенциальной ямы стремится к форме стационарного распределения, но со своим весовым коэффициентом. Следовательно, для решения (2.32) целесообразно использовать метод Крамерса [109]. Согласно выбранной методике, представим функцию $Q(\theta, t)$ в следующем виде

$$Q(\theta, t) = \tilde{Q}_{qe}(\theta, t) \begin{cases} p_+(t) / n_+(t), & 0 \leq \theta \leq \theta_0 \\ p_-(t) / n_-(t) & \theta_0 < \theta < \pi \end{cases}, \quad (2.36)$$

где

$$p_+(t) = \int_0^{\theta_0(t)} Q(\theta, t) d\theta, \quad p_-(t) = \int_{\theta_0(t)}^{\pi} Q(\theta, t) d\theta \quad (2.37)$$

– вероятности того, что полярный угол вектора m принадлежит соответственно интервалу $(0, \theta_0(t))$ или $(\theta_0(t), \pi)$, $\theta_0(t)$ – угол, отвечающий максимуму энергии W_0 , который, согласно (2.25), дается выражением

$$\theta_0(t) = \arccos(-b(t)). \quad (2.38)$$

И, наконец,

$$n_+(t) = \int_0^{\theta_0(t)} \tilde{Q}_{qe}(\theta, t) d\theta, \quad n_-(t) = \int_{\theta_0(t)}^{\pi} \tilde{Q}_{qe}(\theta, t) d\theta. \quad (2.39)$$

Интегралы в (2.39) в общем случае не могут быть вычислены аналитически. Однако это возможно в случае, когда поле анизотропии H_a много больше дипольного поля $H(t)$, и в случае низких температур. Вместе эти два случая можно задать условиями

$$a(1 - |b(t)|)^2 \gg 1, \quad |b(t)| < 1. \quad (2.40)$$

Найдём асимптотические значения (2.39), удовлетворяющие условиям (2.40). Если неравенства (2.40) выполняются для отрицательного значения $b(t)$, то для положительного они также будут выполняться. Согласно определённому ранее виду функции $\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)$

$$n_+(t) = \int_0^{\theta_0(t)} \sin \theta \exp[a(\cos^2 \theta + 2b(t)\cos \theta)] d\theta.$$

Пусть $x = \cos \theta$, тогда с учётом того, что $\cos \theta_0(t) = -b(t)$ последнее выражение запишем как

$$n_+(t) = \int_{-b(t)}^1 \exp[a(x^2 + 2b(t)x)] dx.$$

Выделим полный квадрат в аргументе экспоненты, введём новую переменную $y = x + b(t)$, а также умножим и разделим правую часть на $\exp[a(1 + b(t))^2]$, в результате получим

$$n_+(t) = \exp[a(1 + b(t))^2 - ab^2(t)] \int_0^{1+b(t)} \exp[-a(1 + b(t) - y)(1 + b(t) + y)] dy.$$

Так как $a \rightarrow \infty$, вклад в интеграл дает только верхний предел, тогда, согласно [127], $n_+(t)$ может быть представлено как

$$n_+(t) = \exp[a(1 + b(t))^2 - ab^2(t)] \int_0^{1+b(t)} \exp[-a(1 + b(t) - y)(1 + b(t) + 1 + b(t))] dy.$$

Последний интеграл является табличным, вычислив его, получим выражение

$$n_+(t) = \frac{\exp[a(2b(t)+1)]}{2a(1+b(t))} \left(1 - \exp[-2a(1+b(t))^2]\right). \quad (2.41)$$

Выражение (2.41) будет востребовано в дальнейшем. С учётом того, что $a \rightarrow \infty$, $n_+(t)$ может быть представлено приближённым соотношением

$$n_+(t) \approx \frac{\exp[a(2b(t)+1)]}{2a(1+b(t))}. \quad (2.42)$$

Аналогичным образом находим $n_-(t)$. По определению

$$n_-(t) = \int_{\theta_0(t)}^0 \sin \theta \exp[a(\cos^2 \theta + 2b(t)\cos \theta)] d\theta.$$

Проделав те же самые процедуры, что и при выводе $n_+(t)$, найдём следующие асимптотические соотношения для $n_-(t)$:

$$n_-(t) = \frac{\exp[a(2b(t)-1)]}{2a(1-b(t))} \left(1 - \exp[-2a(1-b(t))^2]\right), \quad (2.43)$$

$$n_-(t) \approx \frac{\exp[a(2b(t)-1)]}{2a(1-b(t))}. \quad (2.44)$$

Далее проинтегрируем обе части уравнения (2.35), получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = \frac{1}{t, a} \tilde{Q}_{qe}(\theta, t) \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{Q(\theta, t)}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \right). \quad (2.45)$$

Перенесём $\tilde{Q}_{qe}(t)$ в левую часть и ещё раз проинтегрируем это уравнение по θ в пределах от 0 до $\theta_0(t)$

$$\int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \right) d\theta = \frac{1}{t, a} \int_0^{\theta_0(t)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{Q(\theta, t)}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \right) d\theta.$$

Распишем левую часть этого выражения. Интеграл в скобках будем вычислять следующим образом. Подставим в данный интеграл выражение для $Q(\theta, t)$ (2.36), учитывая, что $\theta < \theta_0$,

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \int_0^\theta \sin \vartheta \exp \left[a \left(\cos^2 \vartheta + 2b(t) \cos \vartheta \right) \right] d\vartheta.$$

Введём новую переменную $x = \cos \vartheta$, выделим полный квадрат в аргументе экспоненты и представим вышеуказанное выражение в виде

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \exp \left[-ab^2(t) + (1+b(t))^2 \right] \int_{\cos \theta}^1 \exp \left[a(x+b(t))^2 - (1+b(t))^2 \right] dx.$$

Осуществив замену переменной интегрирования ($y = 1 - x$), получим

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \exp \left[a(2b(t) + 1) \right] \int_0^{1-\cos \theta} \exp \left[-ay(2 + 2b(t) - y) \right] dy.$$

При $a \rightarrow \infty$ основной вклад в интеграл даёт нижний предел и, согласно [127], искомый интеграл приближенно можно представить в виде

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \approx \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \exp \left[a(2b(t) + 1) \right] \int_0^{1-\cos \theta} \exp \left[-2ay(1 + b(t)) \right] dy.$$

Вычисление интеграла в правой части даёт

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = \frac{p_+(t) \exp[a(2b(t)+1)]}{n_+(t) 2a(1+b(t))} (1 - \exp[-2a(1+b(t))(1-\cos\theta)]).$$

Подставив в последнее выражение (2.41), получим

$$\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta = p_+(t) \frac{1 - \exp[-2a(1+b(t))(1-\cos\theta)]}{1 - \exp[-2a(1+b(t))^2]}.$$

С учетом последнего равенства левую часть (2.45) можно записать как

$$\begin{aligned} & \int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \right) d\theta = \\ & = \int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(p_+(t) \frac{1 - \exp[-2a(1+b(t))(1-\cos\theta)]}{1 - \exp[-2a(1+b(t))^2]} \right) d\theta. \end{aligned}$$

Подставив в последнее соотношение $\tilde{Q}_{qe} = Q_{qe} / C(t)$, где Q_{qe} определяется из (2.33), и введя новую переменную $x = \cos\theta$, получим

$$\int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \right) d\theta = \int_{-b(t)}^1 \frac{\exp[-d(x^2 + 2b(t)x)]}{1-x^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(p_+(t) \frac{1 - \exp[-2a(1+b(t))(1-x)]}{1 - \exp[-2a(1+b(t))^2]} \right) dx.$$

Значение дроби, стоящей после $p_+(t)$, при условии $a \rightarrow \infty$, быстро стремится к 1. Выделив полный квадрат в показателе первой экспоненты подынтегрального выражения, легко увидеть, что основной вклад в интеграл по x даёт нижний предел, поэтому это выражение можно упростить следующим образом

$$\int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \right) d\theta \approx \frac{\dot{p}_+(t) e^{-ab^2(t)}}{1-b^2(t)} \int_{-b(t)}^1 \exp[-a(x+b(t))^2] dx.$$

Рассмотрим интеграл в правой части последнего выражения. При $a \rightarrow \infty$ справедливо следующее асимптотическое соотношение:

$$\int_{-b(t)}^1 \exp[-a(x^2 + 2b(t)x)] dx \approx e^{ab^2(t)} \int_0^\infty \exp(-ay^2) dy, \quad (y = x + b(t)).$$

Используя тот факт, что $\int_0^\infty \exp(-ay^2)dy = 0.5\sqrt{\pi/a}$, запишем левую часть (2.35) в виде

$$\int_0^{\theta_0(t)} \frac{1}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\theta Q(\vartheta, t) d\vartheta \right) d\theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\dot{p}_+(t)}{1-b^2(t)}. \quad (2.46)$$

Учитывая разрывность функции $Q(\theta, t)$, непосредственно следующую из выражения (2.36), правую часть (2.35) запишем как

$$\frac{1}{t_r a} \int_0^{\theta_0(t)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{Q(\theta, t)}{\tilde{Q}_{qe}(\theta, t)} \right) d\theta = \frac{1}{t_r a} \int_0^{\theta_0(t)} \left(\frac{p_-(t)}{n_-(t)} - \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \right) \delta(\theta - \theta_0(t)).$$

При интегрировании этого выражения воспользуемся фильтрующим свойством δ -функции: $\int_{-\infty}^{x_0} A(x) \delta(x - x_0) dx = 0.5 A(x_0)$ [108]. Приравняв преобразованные левую и правую части (2.35), получим

$$\sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\dot{p}_+(t)}{1-b^2(t)} = \frac{1}{t_r a} \left(\frac{p_-(t)}{n_-(t)} - \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \right). \quad (2.47)$$

Среднее значение намагниченности ансамбля (2.21) с учётом представления $P_0(\psi_1, \psi_2, t) = Q(\psi_1, t)/2\pi = Q(\theta, t)/2\pi$ можно записать в виде суммы двух интегралов

$$\overline{m_z(t)} = m \int_0^{\theta_0(t)} \cos \theta Q(\theta, t) d\theta + m \int_{\theta_0(t)}^\pi \cos \theta Q(\theta, t) d\theta.$$

С учётом (2.36) это выражение перепишем в виде

$$\overline{m_z(t)} = m \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \int_0^{\theta_0(t)} \cos \theta \tilde{Q}(\theta, t) d\theta + m \frac{p_+(t)}{n_+(t)} \int_{\theta_0(t)}^\pi \cos \theta \tilde{Q}(\theta, t) d\theta. \quad (2.48)$$

Вычисление интегралов в (2.48) аналогично вычислению $n_+(t)$ и $n_-(t)$, поэтому приведём сразу окончательные выражения

$$\int_0^{\theta_0(t)} \cos \theta \tilde{Q}(\theta, t) d\theta = \frac{\exp[a(1+2b(t))]}{2a(1+b(t))}, \quad \int_{\theta_0(t)}^{\pi} \cos \theta \tilde{Q}(\theta, t) d\theta = \frac{\exp[a(1-2b(t))]}{2a(1-b(t))}.$$

Используя эти выражения, а также вычисленные ранее значения $n_+(t)$ и $n_-(t)$, (соответственно (2.42) и (2.44)), (2.48) приведем к виду

$$\overline{m_z(t)} = m[p_+(t) - p_-(t)].$$

Воспользовавшись равенством $p_-(t) = 1 - p_+(t)$, последнюю формулу перепишем как

$$\overline{m_z(t)} = m\rho(t), \quad (2.49)$$

где $\rho(t) = 2p_+(t) - 1$ – приведённая намагниченность.

Таким образом, чтобы получить закон магнитной релаксации, необходимо найти функцию $\rho(t)$. Используя определение $\rho(t) = 2p_+(t) - 1$, (2.47) преобразуется к обыкновенному дифференциальному уравнению, решением которого является приведённая намагниченность

$$\dot{\rho}(t) = -\rho(t) \left(\frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)} \right) - \frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)}. \quad (2.50)$$

Здесь

$$t_s^\sigma(t) = \frac{t_r \sqrt{\pi/a(t)}}{2(1-b^2(t))(1+\sigma b(t))} \exp[a(t)(1+\sigma b(t))^2] \quad (2.51)$$

– средние времена пребывания магнитного момента $\mathbf{m}(t)$ в положительном ($\sigma = +$) и отрицательном ($\sigma = -$) направлениях оси z . Графики зависимостей $t_s^+(\rho)$ и $t_s^-(\rho)$ приведены на рисунке 2.3.

Уравнение (2.50) определяет функцию $\rho(t)$ при $t > t_{qe}$, когда известно квазиравновесное распределение \mathbf{m} . Характеристическое время t_{qe} удовлетворяет условию $t_{qe}/t_s^+(t) \ll 1$, которое показывает, что для времени $t \sim t_{qe}$ вероятность того, что \mathbf{m} изменит знак, пренебрежимо мала. Выберем начало отсчёта времени в произвольный момент $t \sim t_{qe}$ и запишем начальное условие для (2.50) в виде $\rho(0) = 1$.

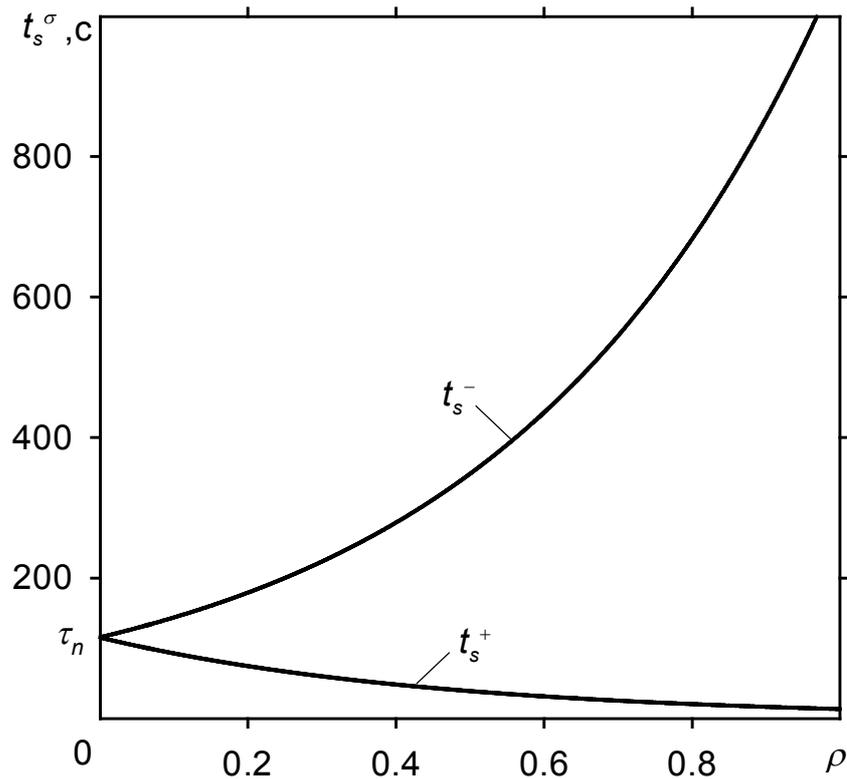


Рис. 2.3. Зависимость t_s^σ от приведённой намагниченности для квадратной решётки Co частиц с параметрами $r = 4$ нм; $d = 6r$; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $T = 300$ К; $p = 1$.

Представим $b(t)$ с учётом (2.30) и (2.49) в следующем виде:

$$b(t) = -\xi\rho(t), \quad (2.52)$$

где параметр $\xi = 8pS_1m/d^3H_a$ характеризует интенсивность дипольного взаимодействия.

Так как правая часть уравнения (2.50) зависит от t только посредством $\rho(t)$, обозначим её как $-F(\rho(t))$ и, используя начальное условие, преобразуем (2.50) к

$$\int_{\rho(t)}^1 \frac{dx}{F(x)} = t. \quad (2.53)$$

Легко убедиться, что $F(x) > 0$ при $0 < x \leq 1$ и $F(0) = 0$. Это значит, что решение уравнения (2.53) есть убывающая функция времени: $\rho(t_1) > \rho(t_2)$, если $t_1 < t_2$ и $\rho(\infty) = 0$.

0. Однако точное решение (2.53) можно найти только для следующих предельных случаев:

1) $p = 0$ – случай, когда частицы бесконечно удалены друг от друга, а значит взаимодействием между ними можно пренебречь;

2) $t \ll t_s^p(0)$ – случай, когда практически все магнитные моменты сориентированы в первоначальном направлении – начальный этап релаксации;

3) $t \gg t_s^p(\infty)$ – случай, когда количество магнитных моментов, сориентированных в одном направлении, приблизительно равно количеству моментов, сориентированных в обратном – заключительный этап релаксации.

Рассмотрим детально каждый случай. Первый соответствует приближению невзаимодействующих частиц. Согласно (2.30), в этом случае $\xi = 0$, (2.51) дает $t_s^\sigma(t) = 2t_r \sqrt{\pi/a} e^a$, и уравнение (2.53) принимает вид

$$\int_{\rho(t)}^1 \frac{t_r \sqrt{\pi/16ae^a} dx}{x} = t.$$

откуда получаем

$$\rho(t) = \exp(-t/\tau_n), \quad (2.54)$$

где

$$\tau_n = t_r \sqrt{\pi/16ae^a}. \quad (2.55)$$

Для второго случая выполняется условие $\rho(t) \approx 1$. Заменим $F(x)$ на $F(1) = 1/\tau_0$, ($\tau_0 = 2/t_s^+(0)$), получим

$$\rho(t) = 1 - t/\tau_0, \quad (2.56)$$

где

$$\tau_0 = t_r \sqrt{\pi/a} \frac{\exp[a(1-\xi)^2]}{4(1-\xi^2)(1-\xi)}. \quad (2.57)$$

В последнем случае, когда имеет место условие $\rho(t) \approx 0$, то малая окрестность

нижнего предела даёт главный вклад в левую часть (2.53). Представим функцию $F(x)$ в виде ряда Тейлора, ограничиваясь линейным членом. Так как $F(0) = 0$, то $F(x) = xF'(0)$. Представим средние времена нахождения магнитных моментов вдоль положительного или отрицательного направления (2.51) в следующем виде:

$$t_s^\sigma(t) = \frac{t_r \sqrt{\pi/a}}{2(1 - \xi^2 \rho^2(t)) (1 - \sigma \xi \rho(t))} \exp[a(1 - \sigma \xi \rho(t))^2]$$

и найдём производную $F'(\rho)$

$$F'(\rho(t)) = \frac{d}{d\rho(t)} \left[\rho(t) \left(\frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)} \right) + \frac{1}{t_s^+(t)} - \frac{1}{t_s^-(t)} \right]. \quad (2.58)$$

В случае, когда $t \rightarrow \infty$ намагниченность $\rho \rightarrow 0$, (2.58) имеет вид

$$F'(\rho(t))|_{\rho(t) \rightarrow 0} = \frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)} + \frac{d}{d\rho(t)} \left(\frac{1}{t_s^+(t)} \right) - \frac{d}{d\rho(t)} \left(\frac{1}{t_s^-(t)} \right).$$

Производные $d(1/t_s^\sigma)/d\rho$ при $\rho \rightarrow 0$ могут быть представлены как

$$\frac{d}{d\rho(t)} \left(\frac{1}{t_s^\sigma(t)} \right) = \frac{1}{t_s^\sigma(t)} \sigma \xi (1 - 2a).$$

Тогда определив время релаксации как $\tau_\infty = 1/F'(0)$,

$$\tau_\infty = t_r \sqrt{\pi/a} \frac{e^a}{4[1 + (2a - 1)\xi]}, \quad (2.59)$$

из уравнения (2.50) получим асимптотическое выражение закона релаксации на больших временах

$$\rho(t) \sim \exp(-t/\tau_\infty). \quad (2.60)$$

Анализ выражений (2.57) и (2.59) показывает, что при $a(1 - \xi)^2 \gg 1$ и $\xi \neq 0$ выполняется следующие условия:

$$\tau_0 < \tau_\infty < \tau_n \quad (2.61)$$

Заметим, что при $\zeta = 0$, т.е. в приближении невзаимодействующих частиц, неравенство (2.61) обращается в равенство $\tau_0 = \tau_\infty = \tau_n$.

Времена релаксации τ_0 , τ_∞ и τ_n по-разному зависят от параметров системы, поэтому при изменении этих параметров скорости релаксации для приближения среднего поля и для приближения невзаимодействующих частиц будут изменяться по различным законам. В качестве примера рассмотрим конкретную систему Со наночастиц со следующими характеристиками $\lambda = 0.2$; $r = 4$ нм; $d = 6r$; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $p = 1$. На рисунке 2.4 показаны температурные зависимости отношений τ_0/τ_n и τ_∞/τ_n при $r = 4$ нм. Очевидно, что с ростом температуры релаксация должна протекать быстрее и времена релаксации τ_0 , τ_∞ и τ_n должны уменьшаться. Такое поведение отношений τ_0/τ_n и τ_∞/τ_n свидетельствует о том, что τ_n убывает более быстро с

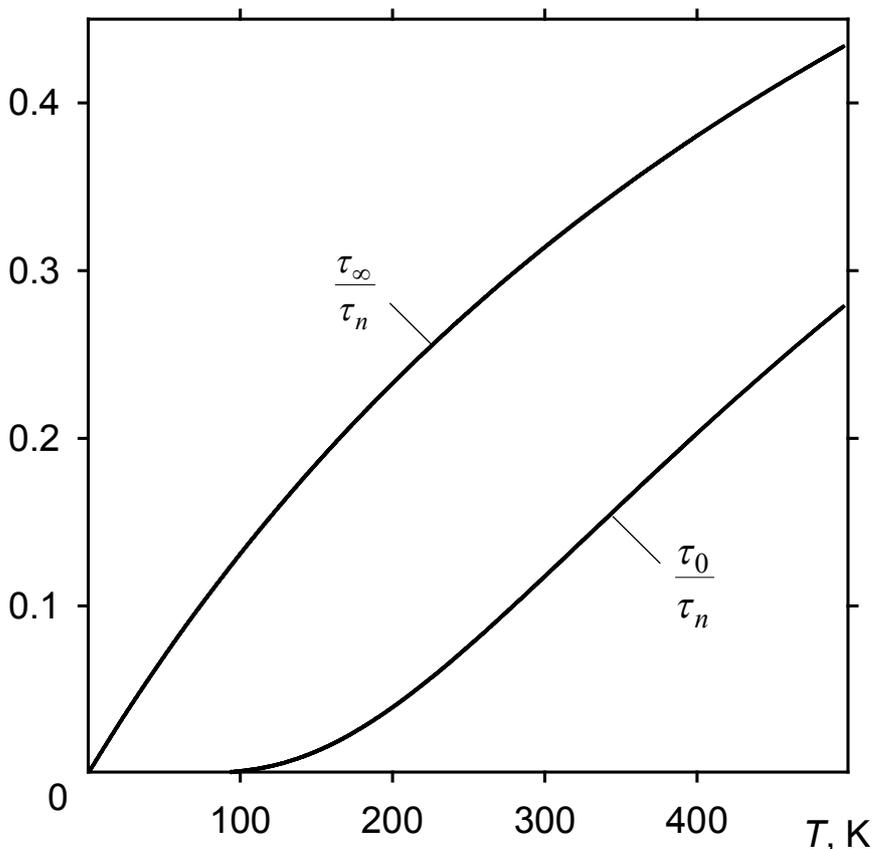


Рис. 2.4. Температурные зависимости отношений времён релаксации.

температурой, чем τ_∞ и τ_0 . Особенно различие велико для малых времён при низких температурах, когда большие дипольные поля обуславливают более быстрый процесс релаксации, чем одни лишь тепловые флуктуации. Таким образом, в рамках приближения среднего дипольного поля убеждаемся, что дипольное взаимодействие существенным образом влияет на температурные свойства ансамбля частиц.

С ростом размеров наночастицы, растёт величина магнитного момента, следовательно, его направление становится менее подверженным действию тепловых флуктуаций. Это служит причиной того, что с увеличением размеров частиц, релаксация в системе невзаимодействующих частиц протекает более медленно. При наличии взаимодействия, кроме повышения температурной стабильности, рост величины магнитных моментов приводит ещё и к увеличению дипольных полей. В силу антиферромагнитного характера дипольного взаимодействия это должно привести к ускорению релаксации. Однако при условии,

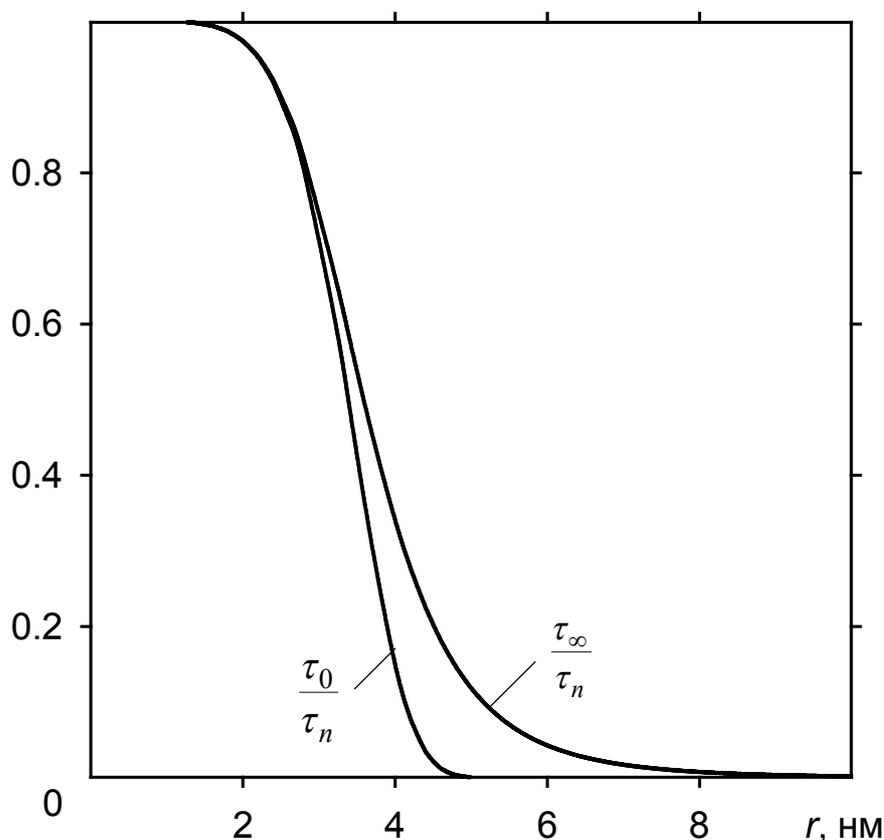


Рис. 2.5. Зависимости отношений времён релаксации от размеров наночастиц.

что эффективное поле анизотропии H_a превышает дипольные поля, рост линейных размеров частиц в целом приводит к увеличению времён релаксации τ_0 , τ_∞ и τ_n и к замедлению процесса релаксации.

На рисунке 2.5 приведена связь между отношениями τ_0/τ_n , τ_∞/τ_n и линейными размерами частиц размещённых в узлах решетки с периодом $d = 24$ нм для температуры $T = 300$ К. Поскольку τ_0 , τ_∞ и τ_n являются возрастающими функциями r , данные зависимости иллюстрируют, что релаксация в системе с взаимодействием, протекает значительно быстрее, чем предсказывает приближение невзаимодействующих частиц. Различие между приближениями среднего поля и невзаимодействующих частиц особенно существенны для ансамблей с большой плотностью упаковки.

Зная асимптотическое поведение функции $\rho(t)$, мы можем подобрать аппроксимационную формулу, справедливую для любого времени. Легко убедиться, что выражение

$$\rho(t) = \frac{\tau_0/\tau_\infty}{\exp(t/\tau_\infty) + \tau_0/\tau_\infty - 1} \quad (2.62)$$

переходит в (2.56) при $t \rightarrow 0$ и в (2.60) при $t \rightarrow \infty$. Формула (2.62) показывает, что в отличие от случая невзаимодействующих частиц, который характеризуется одним временем релаксации τ_n , магнитная релаксация взаимодействующих частиц характеризуется двумя временами релаксации: начальным τ_0 и конечным τ_∞ .

2.4. Численный анализ закона магнитной релаксации

Как показано выше, уравнение (2.53), а значит и уравнение (2.50), имеет точное решение только для предельных случаев. Поэтому для установления закона магнитной релаксации необходимо воспользоваться численными методами. Уравнение (2.50) является обыкновенным дифференциальным уравнением 1-го порядка. Среди многообразия методов численного интегрирования подоб-

ных уравнений наиболее простым, и в то же время дающим сравнительно точные результаты, является метод Рунге-Кутты 4-го порядка точности [128]. Реализовав данный алгоритм, будем исследовать закон магнитной релаксации, варьируя параметры системы.

Зная численное решение (2.50), мы можем оценить степень точности аппроксимационной формулы (2.62). Здесь, как и в предыдущем случае, выбраны следующие параметры системы: $\lambda = 0.2$; $r = 4$ нм; $d = 6r$; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $p = 1$; $T = 300$ К. Из рисунка 2.6 можно увидеть, что точное решение лежит выше аппроксимационного. С уменьшением d – т.е. ростом плотности упаковки, погрешность аппроксимации (2.62) растёт. Таким образом, для плотноупакованных решёток, когда интенсивность дипольного взаимодействия велика, использовать выражение (2.62) не целесообразно из-за большой ошибки на промежуточных временах.

Влияние на релаксацию плотности упаковки ансамбля показано на рисунке 2.7. В случае, когда вероятность размещения частицы в узле решётки $p = 0$ (кривая

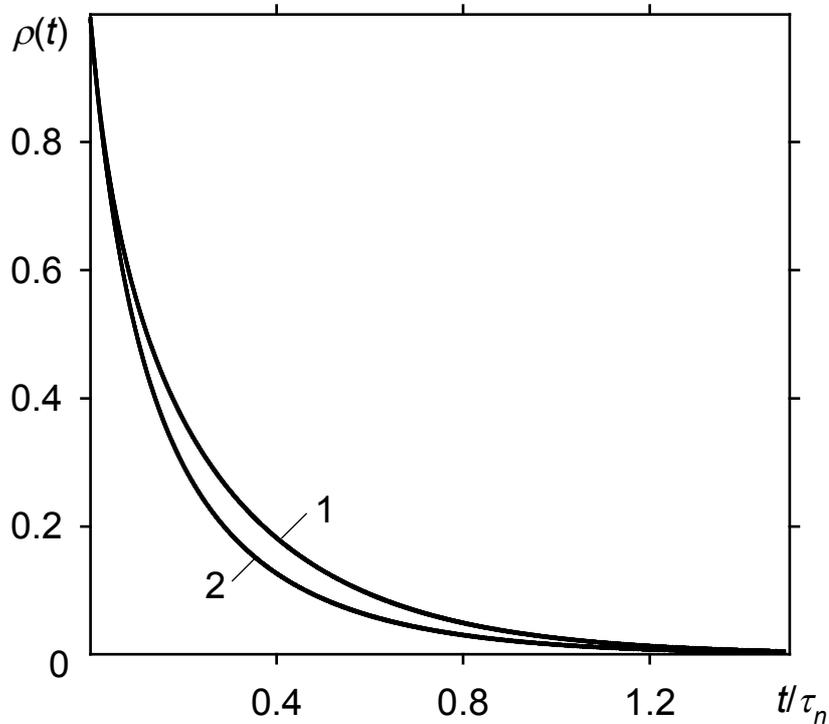


Рис. 2.6. Закон магнитной релаксации, 1 – полученный численно, 2 – по аппроксимационной формуле

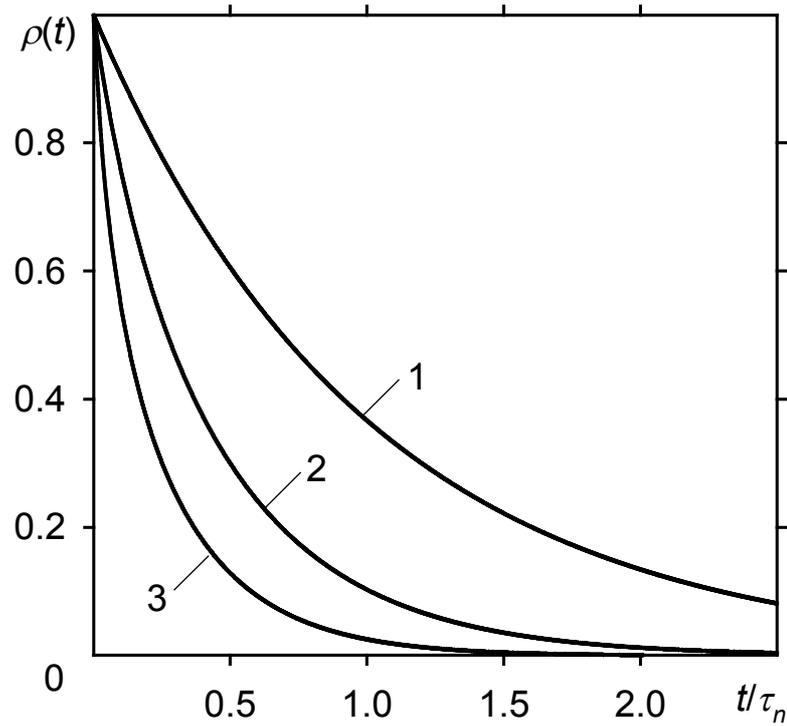


Рис. 2.7. Поведение релаксации в зависимости от значения p ;
 1 – $p = 0$, 2 – $p = 0.5$, 3 – $p = 1$

1), что соответствует приближению невзаимодействующих частиц, функция $\rho(t)$ убывает наиболее медленно. С увеличением вероятности, среднее расстояние между частицами будет уменьшаться, следовательно, интенсивность дипольного взаимодействия будет расти, и релаксация намагниченности ансамбля будет протекать быстрее (кривые 1, 2). Этот факт подтверждает, что взаимодействие между частицами приводит к ускорению процесса релаксации

Характер температурной зависимости функции $\rho(t)$ можно проследить на рисунке 2.8 по положению графиков $\rho(t)$ при различных температурах. Как и следовало ожидать, с ростом температуры, что в данном приближении приводит к росту интенсивности теплового поля, темп релаксации возрастает. Поскольку значения температура для всех трёх зависимостей, приведённых на рисунке 2.8, отличаются незначительно, можно сделать вывод, что для достаточно малых линейных размеров наночастиц, температурный режим играет определяющую роль для протекания релаксации.

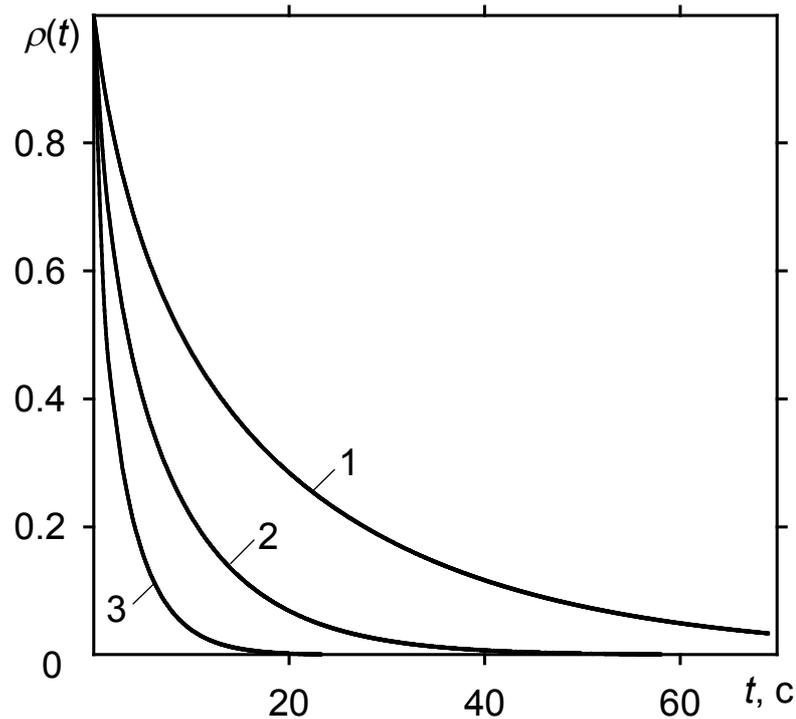


Рис. 2.8. – Поведение релаксации в зависимости от температуры;
1 – $T = 290$ К, 2 – $T = 300$ К, 3 – $T = 310$ К.

Анализ двух последних рисунков важен с точки зрения оценки надёжности современных устройств магнитной записи и хранения информации с перпендикулярной анизотропией. Для данных устройств важнейшими характеристиками являются ёмкость и термостабильность [46]. Повышение ёмкости производится за счёт увеличения плотности упаковки наночастиц и уменьшения их линейных размеров. Увеличение плотности приводит к увеличению интенсивности дипольного взаимодействия магнитных моментов наночастиц, и, следовательно, учёт взаимодействия для оценки надёжности становится приоритетной задачей. Малые размеры наночастиц обуславливают большую подверженность системы влиянию тепловых флуктуаций и повышение температуры всего на несколько кельвинов будет приводить к потерям информации. Поэтому чтобы подобрать оптимальное соотношение ёмкости устройства и его надёжности, необходимо иметь количественную теорию процесса термоиндуцированной релаксации намагниченности.

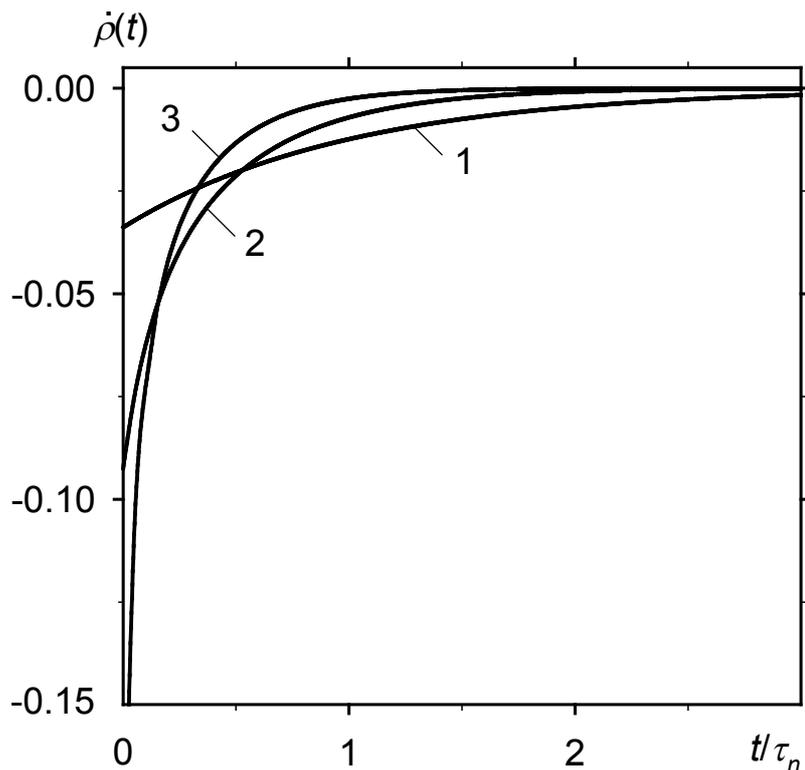


Рис. 2.9. Поведение скорости релаксации в зависимости от значения p ;
 $1 - p = 0, 2 - p = 0.5, 3 - p = 1$.

Важной характеристикой является скорость релаксации скорость релаксации dp/dt . Сравнение (2.61) асимптотических решений уравнения (2.53) показывает, что темп релаксации убывает со временем, что обусловлено взаимодействием между магнитными моментами. На это было указано в работе [94], однако в настоящей диссертации этот вывод следует из более строгой модели. Рисунки (2.9) и (2.10) показывают, что скорость релаксации монотонно убывает со временем. Различие в темпах релаксации связаны с тем, что для одного и того же времени ансамбли с различной температурой или плотностью упаковки достигают различных значений намагниченности ρ и, следовательно, находятся под воздействием различных значений среднего дипольного поля $H(t)$.

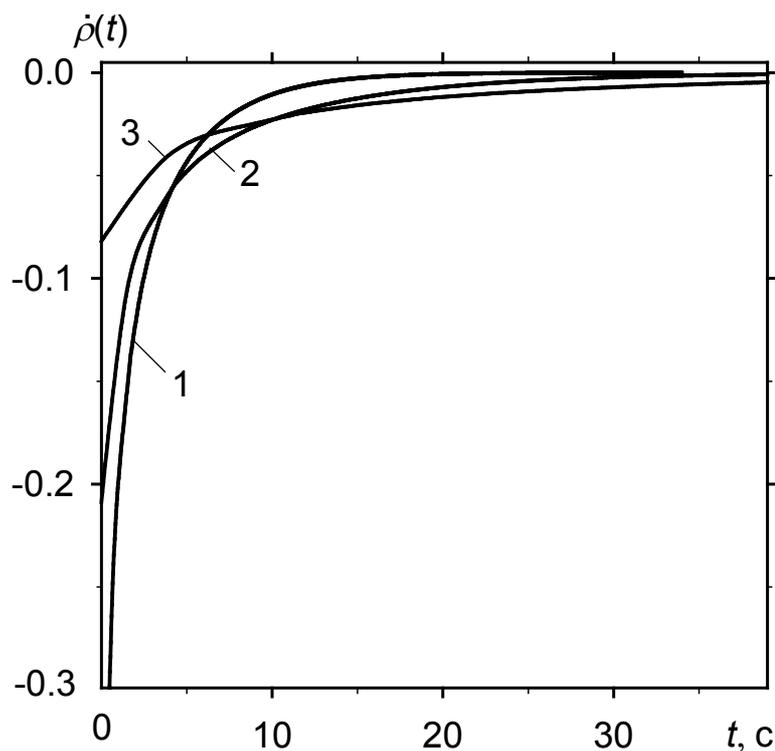


Рис. 2.10. Поведение скорости релаксации в зависимости от температуры
 1 – $T = 290$, 2 – $T = 300$, 3 – $T = 310$.

2.5. Релаксация при наличии поля смещения

Рассмотренная ранее модель относится к случаю отсутствия внешнего поля. Однако интерес может представлять динамика намагниченности в поле смещения – т.е. во внешнем поле, направленном вдоль либо против плоскости распределения наночастиц. В частности, работа устройств записи и хранения информации предполагает наличие поля смещения, посредством которого производится запись.

Пусть двумерная решётка наночастиц (см. рис. 2.2) находится в некотором ненулевом поле смещения H_0 . ($\mathbf{H}_0 = \mathbf{e}_z H_0$). Энергия системы (2.13) в этом случае переписется как

$$W' = -\frac{\beta}{2V} \sum_i (\mathbf{m}_i \mathbf{e}_z)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j) r_{ij}^2 - 3(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} + \sum_i \mathbf{H}_0 \mathbf{m}_i$$

Оставаясь в рамках приближения среднего поля, магнитная энергия выбранной наночастицы при наличии внешнего поля примет вид

$$W'_0 = -(H_a/2m)m_z^2 - \mathbf{m}\mathbf{H}(t) + \mathbf{m}\mathbf{H}_0$$

В случае, когда внешнее поле не нарушает предположения о бистабильном состоянии каждого магнитного момента – т. е. когда сумма дипольного и внешнего полей не превышает поля анизотропии – все проделанные выкладки легко обобщить на случай $H_0 \neq 0$. Решая соответствующее равнение Фоккера-Планка методом Крамерса, приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению аналогичному (2.50)

$$\dot{\rho}(t) = -\rho(t) \left(\frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)} \right) - \frac{1}{t_s^+(t)} + \frac{1}{t_s^-(t)}, \quad (2.63)$$

где

$$t_s^{\sigma}(t) = \frac{t_r \sqrt{\pi/a}}{2(1 - B^2(t))(1 + \sigma B(t))} \exp[a(1 + \sigma B(t))^2], \quad (2.64)$$

где $B(t) = b(t) + b_0(t) = -\zeta\rho(t) + b_0$, $b_0 = H_0/H_a$.

Проанализируем выражения (2.64) для средних времен пребывания магнитного момента $\mathbf{m}(t)$ в положительном ($\sigma = +$) и отрицательном ($\sigma = -$) направлениях оси z . На рисунке 2.11 Показаны зависимости для двух значений поля смещения. Значения внешних и внутренних параметров системы такие же, как и для рисунка 2.3. Основное отличие от случая отсутствия внешнего поля (см. рис. 2.3) заключается в том, что графики $t_s^+(\rho)$ и $t_s^-(\rho)$ пересекаются не при $\rho = 0$, а при некотором ρ_0 . Так, для $H_0 = 100 \text{ Э}$ ($7.96 \cdot 10^3 \text{ А/м}$), или $b_0 = 1.56 \cdot 10^{-2}$, $\rho_0 \approx 0.41$, а для $H_0 = -100 \text{ Э}$ ($-7.96 \cdot 10^3 \text{ А/м}$), или $b_0 = -1.56 \cdot 10^{-2}$, точка пересечения лежит в области отрицательных ρ , и на рисунке не показана. Отметим,

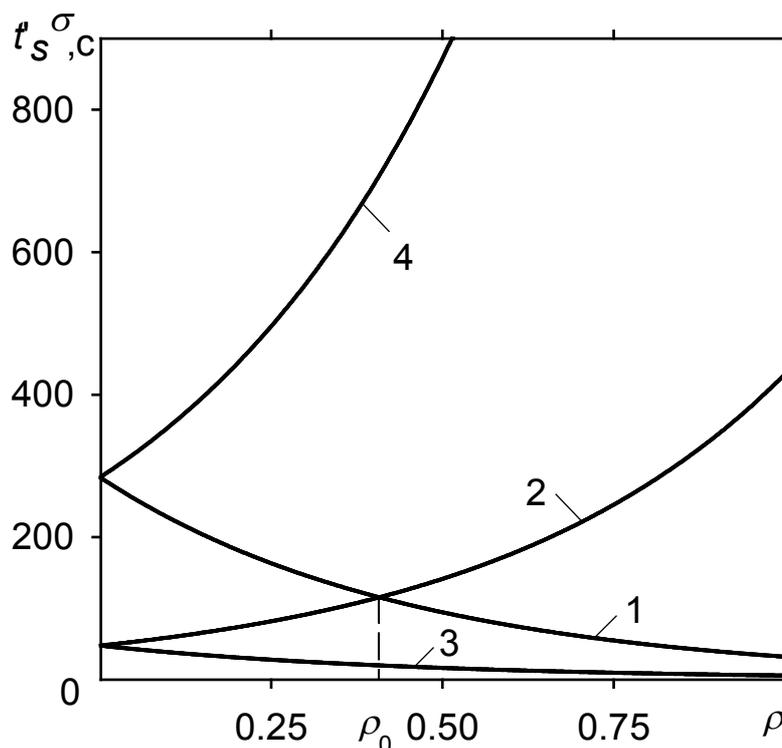


Рис. 2.11. Зависимость t_s^σ от средней намагниченности для ненулевого поля смещения: 1 – t_s^+ для $b_0 = 1.56 \cdot 10^{-2}$, 2 – t_s^- для $b_0 = 1.56 \cdot 10^{-2}$, 3 – t_s^+ для $b_0 = -1.56 \cdot 10^{-2}$, 4 – t_s^- для $b_0 = -1.56 \cdot 10^{-2}$.

что точка ρ_0 не соответствует намагниченности основного состояния в приближении среднего поля. В силу того, что число магнитных моментов, ориентированных в разных направлениях теперь различно, равенство вероятностей переворотов магнитных моментов уже не будет удовлетворять условию детального баланса.

Таким образом, приближение среднего поля отражает тот факт, что поле смещения способствует определённой ориентации магнитных моментов, увеличивая потенциальный барьер для переориентации, если магнитный момент направлен вдоль поля и уменьшая барьер в противоположном случае. Величина намагниченности основного состояния ρ_1 зависит от величины поля смещения и может быть вычислена с помощью алгебраического уравнения, полученного из (2.63)

$$\rho_1 \left(\frac{1}{t_s'^+(t)} + \frac{1}{t_s'^-(t)} \right) + \frac{1}{t_s'^+(t)} - \frac{1}{t_s'^-(t)} = 0, \quad (2.65)$$

где $t \rightarrow \infty$.

Последнее уравнение не решается аналитически. Решая его численно, несложно убедиться, что величина ρ_1 также зависит от плотности упаковки (от вероятности размещения частицы в узле p) и от температуры T . На рисунке 2.12 показаны зависимости намагниченности основного состояния от величины отношения поля смещения к полю анизотропии, для ансамбля, параметры которого были заданы выше. Из графиков видно, что более плотно упакованные системы менее подвержены влиянию внешнего поля, о чём свидетельствует более пологое расположение кривой 1 относительно остальных зависимостей.

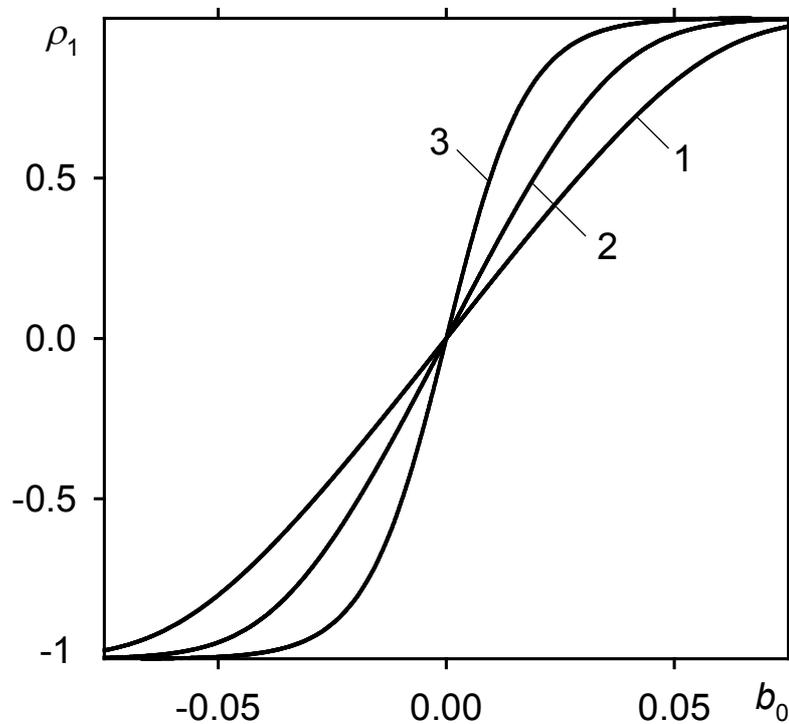


Рис. 2.12. Зависимость ρ_1 от относительной величины внешнего поля для различных значений вероятности p : 1 – $p = 1$; 2 – $p = 0.5$; 3 – $p = 0$.

На рисунке 2.13 приведены аналогичные зависимости, но для различных температур. Увеличение температуры ведёт к повышению интенсивности эффективного теплового поля, и, следовательно, величина потенциального барьера переориентации магнитного момента, обусловленная, в том числе и внешним полем, понижается. Поэтому в любой момент времени существует некоторое

количество магнитных моментов, ориентированных против поля смещения и это количество будет тем больше, чем больше температура. Об этом свидетельствует следующее из рисунка 2.13 отношение $\rho_1(H_0)|_{T=T_1} < \rho_1(H_0)|_{T=T_2}$ при $T_2 < T_1$. Важной особенностью релаксации при наличии внешнего поля, следующей из рисунков 2.12 и 2.13, является то, что при достаточно малых по сравнению с полем анизотропии значениях H_0 , уровень намагниченности основного состояния ρ_1 составляет практически 1. Причиной этому является большое поле анизотропии.

Как и в случае нулевого поля смещения, дифференциальное уравнение (2.63) не может быть решено аналитически. Однако возможно найти асимптотические решения для описанных ранее случаев 1) $p = 0$ – невзаимодействующая система 2) $t \ll t''_{s}(0)$ – начальный этап релаксации; 3) $t \gg t''_{s}(\infty)$ – заключительный этап релаксации.

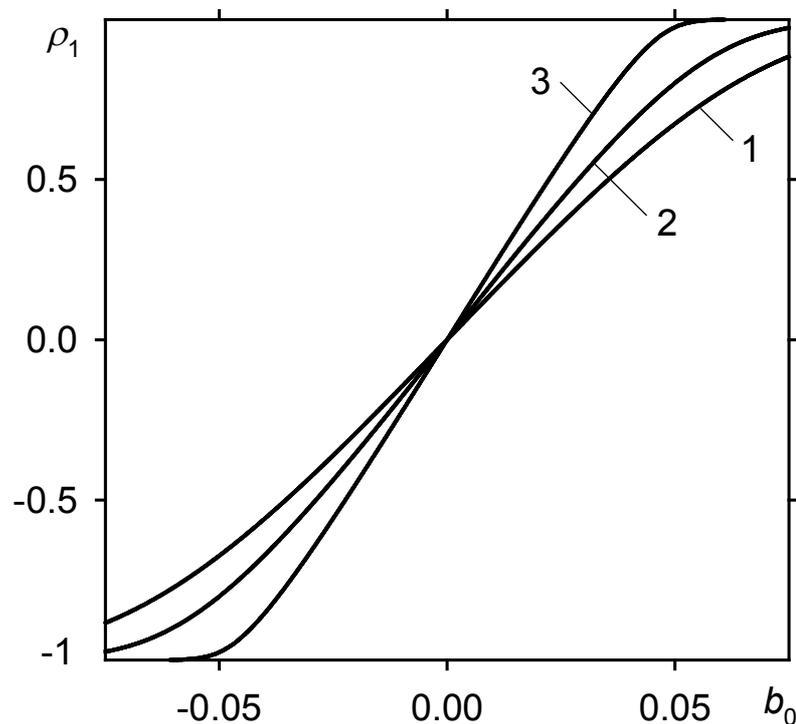


Рис. 2.13. Зависимость ρ_1 от относительной величины внешнего поля для различных значений T : 1 – $T = 500$ К; 2 – $T = 300$ К; 3 – $T = 100$ К.

В первом случае $\xi = 0$, а значит (2.64) преобразуется к виду

$$t'_s{}^\sigma = \frac{t_r \sqrt{\pi/a}}{2(1-b_0^2)(1+\sigma b_0)} \exp[a(1+\sigma b_0)^2],$$

т.е. средние времена нахождения магнитных моментов вдоль положительного и отрицательного направлений оси z одинаковы и не зависят от времени. В этом случае (2.63) представляет собой линейно дифференциальное уравнение первого порядка и записывается как

$$\dot{\rho} = -\frac{2(1-b_0^2)}{t_r \sqrt{\pi/a} \exp[a(1+b_0)^2]} \left[\left(e^{4ab_0}(1-b_0) + 1 + b_0 \right) \rho + \left(e^{4ab_0}(1-b_0) - 1 - b_0 \right) \right],$$

решение которого имеет вид

$$\rho(t) = \exp(-t/\tau'_n) \frac{2(1+b_0)}{e^{4ab_0}(1-b_0) + 1 + b_0} + \frac{e^{4ab_0}(1-b_0) - 1 - b_0}{e^{4ab_0}(1-b_0) + 1 + b_0}, \quad (2.66)$$

где

$$\tau'_n = \frac{t_r \sqrt{\pi/a} \exp[a(1+b_0)^2]}{2(1-b_0^2) \left[e^{4ab_0}(1-b_0) + 1 + b_0 \right]}. \quad (2.67)$$

Легко убедиться, что при $b_0 = 0$, (2.67) переходит в (2.55).

Начальный этап релаксации намагниченности ансамбля при наличии внешнего поля, по сути, ничем не отличается от случая нулевого поля смещения. Поэтому аналогично (2.56) и (2.57), заменяя $-\xi$ на $-\xi + b_0$ можем записать

$$\rho(t) = 1 - t/\tau'_0, \quad (2.68)$$

где

$$\tau'_0 = t_r \sqrt{\pi/a} \frac{\exp[a(1-\xi+b_0)^2]}{4[1-(b_0-\xi)^2](1-\xi+b_0)}. \quad (2.69)$$

Нахождение асимптотики для конечного этапа релаксации усложнено тем, что намагниченность, как было показано выше, стремится не к нулю, а к некоторому значению ρ_1 . Поскольку при $t \rightarrow \infty$ $dp/dt \rightarrow 0$, как и ранее в (2.53) функция $F(\rho_1) \rightarrow 0$, а значит вклад в интеграл в правой части (2.53) будет давать только малая окрестность нижнего предела. Напомним, что теперь $F(x)$ – это правая часть уравнения (2.63). Разложим функцию $F(x)$ в ряд Тейлора до линейного члена с учётом того, что $F(\rho_1) = 0$, $F(x) \approx (x - \rho_1)F'(\rho_1)$. Подставив это выражение в (2.53) и после интегрирования получим асимптотическое решение (2.63)

$$\rho(t) = (1 - \rho_1)\exp(-t/\tau'_\infty) + \rho_1. \quad (2.70)$$

Здесь $\tau'_\infty = 1/(dF(\rho_1)/d\rho)$. Время релаксации τ'_∞ определяется аналогично τ_∞ (2.59), но учитывая наличие ненулевого уровня намагниченности основного состояния. Производные $d(1/t'^\sigma)/d\rho$ определяются выражением

$$\frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{t'^\sigma} \right) = \xi \frac{1}{t'^\sigma} \times \frac{\sigma - 3B - \sigma 2a(1 - B^2)(1 + \sigma B)}{1 - B^2}.$$

Тогда производная

$$\frac{dF(\rho)}{d\rho} = \frac{1}{t_s'^+} + \frac{1}{t_s'^-} + (\rho + 1) \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{t_s'^+} \right) + (\rho - 1) \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{t_s'^-} \right)$$

может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \frac{dF(\rho)}{d\rho} = & \frac{1}{t_s'^+} \left[1 + \xi(\rho + 1) \frac{1 - 3B - 2a(1 - B^2)(1 + B)}{1 - B^2} \right] + \\ & + \frac{1}{t_s'^-} \left[1 + \xi(\rho - 1) \frac{-1 - 3B + 2a(1 - B^2)(1 - B)}{1 - B^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

При $\rho \rightarrow \rho_1$ выполняется условие детального баланса

$$(1 + \rho)/t_s'^+ = (1 - \rho)/t_s'^-,$$

тогда выражение (2.71) может быть упрощено, и окончательно запишем

$$\tau'_\infty = \left(\frac{dF(\rho)}{d\rho} \right)^{-1} = t_s'^+ \left(\frac{2}{1-\rho} + \xi(1+\rho) \frac{4a(1-B^2)-2}{1-B^2} \right)^{-1}, \quad (2.72)$$

где $B \equiv -\xi\rho_1 + b_0$.

Зная асимптотическое поведение временной зависимости намагниченности ансамбля, аналогично случаю нулевого поля смещения, можно аппроксимировать $\rho(t)$ некоторой функцией, асимптотики которой совпадают с асимптотиками искомой зависимости. Наиболее простой вид аппроксимационной формулы следующий:

$$\rho(t) = \rho_1 + \frac{(1-\rho_1)^2 \tau_0 / \tau_\infty}{\exp(t/\tau_\infty) + (1-\rho_1)\tau_0 / \tau_\infty - 1}. \quad (2.73)$$

Закон релаксации в приближении среднего для любого интервала времени также может быть получен путём численного интегрирования уравнения (2.63). На рисунке (2.14) изображены кривые намагниченности для различных

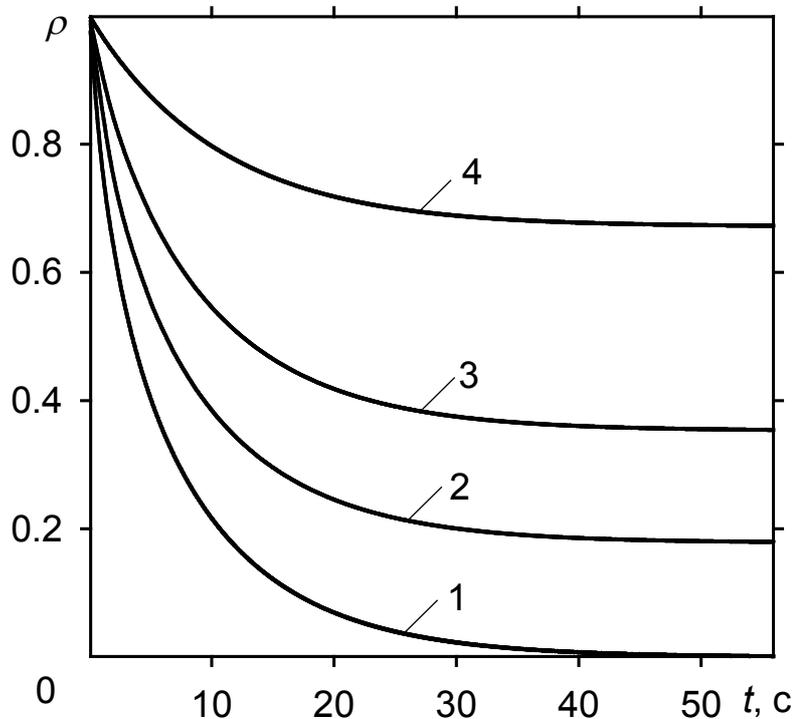


Рис. 2.14. Закон магнитной релаксации для различных значений поля смещения

1 – $b_0 = 0$; 2 – $b_0 = 0.01$; 3 – $b_0 = 0.02$; 4 – $b_0 = 0.04$.

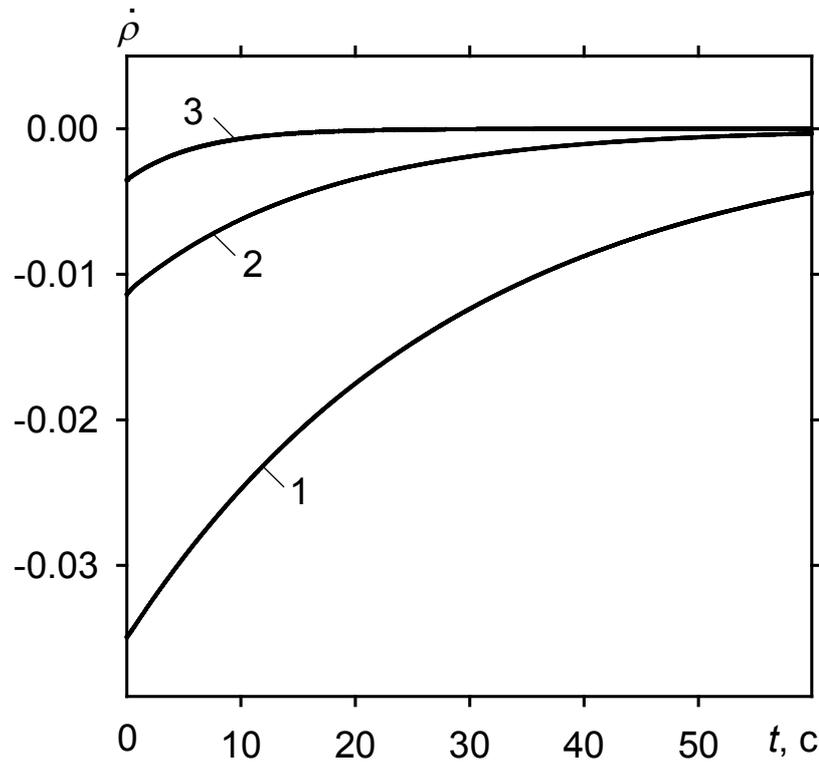


Рис. 2.15. – Скорость релаксации при различных значениях поля смещения: 1 – $b_0 = 0$; 2 – $b_0 = 0.02$; 3 – $b_0 = 0.04$.

значений безразмерной величины b_0 , характеризующей действие поля смещения. Значения остальных параметров соответствуют выбранным ранее: $\lambda = 0.2$; $r = 4$ нм; $d = 6r$; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $p = 1$; $T = 300$ К. Для двух любых значений H_0 график, соответствующий большему значению величины поля смещения при $t > 0$ лежит выше графика, соответствующему меньшему значению H_0 . Величины намагниченности основного состояния, к которым стремятся зависимости, соответствует рассчитанным из уравнения (2.65).

Для скорости релаксации (см. рис. 2.15) $\dot{\rho}(t)$, наблюдается аналогичная закономерность расположения кривых: $\dot{\rho}(t)|_{H_0=H_{01}} < \dot{\rho}(t)|_{H_0=H_{02}}$ при $H_{01} < H_{02}$. В момент времени $t = 0$ значения $\dot{\rho}$ для разных H_0 будут также различны. Это связано с зависимостью времени релаксации τ_0 от внешнего поля, обусловленной изменением высоты потенциального барьера для переориентации магнитного момента. Со временем скорость релаксации, как и в случае нулевого внешнего поля, падает и асимптотически приближается к 0. Времена релакса-

ции τ'_∞ и τ'_0 зависят от величины H_0 таким образом, что возможно выполнение как неравенства $\tau'_\infty < \tau'_0$ так и $\tau'_\infty > \tau'_0$. Следовательно, в случае $H_0 \neq 0$ времена релаксации не есть однозначными характеристиками скорости релаксации.

Зависимость закона релаксации от интенсивности дипольного взаимодействия магнитных моментов наночастиц приобретает ту особенность, что здесь в отличие от случая нулевого поля смещения, различной интенсивности соответствуют различные значения намагниченности основного состояния – см. рисунок 2.16. Как и ранее, интенсивность, характеризуемая параметром ξ (см. экспликацию к (2.52)), задаётся при помощи вероятности p размещения наночасти-

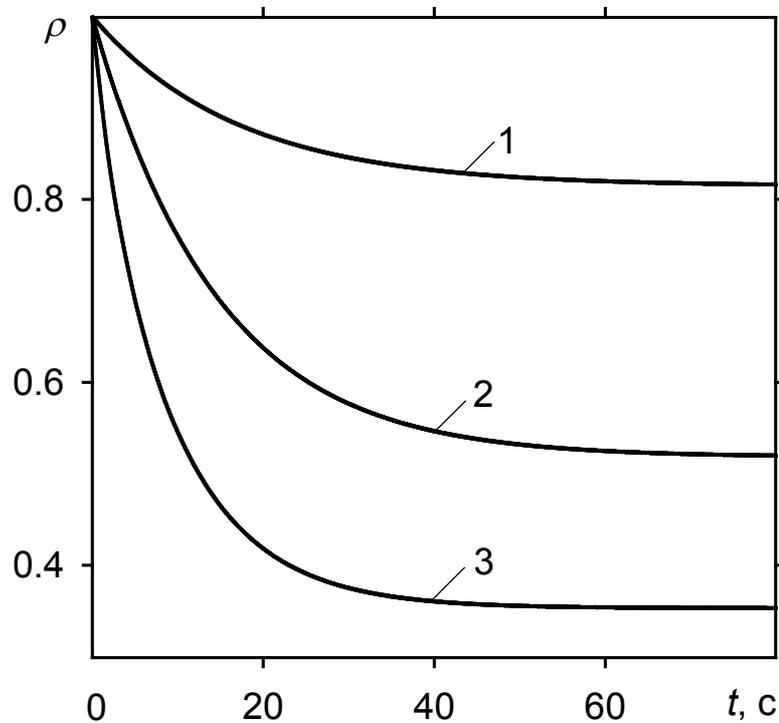


Рис. 2.16. Закон релаксации намагниченности ансамбля в поле смещения для различных p : 1 – $p = 0$, 2 – $p = 0.5$, 3 – $p = 1$.

цы в узле решётки. Значение величины внешнего поля H_0 принималось таким, чтобы $b_0 = 0.02$. Скорость релаксации $\dot{\rho}$ как функция времени приведена на рисунке 2.17. Так же как и в предыдущем случае (см. рис 2.9) $\dot{\rho}$ монотонно убывает со временем, однако, в связи с повышением потенциального барьера переориентации, её значения ограничены меньшим диапазоном значений.

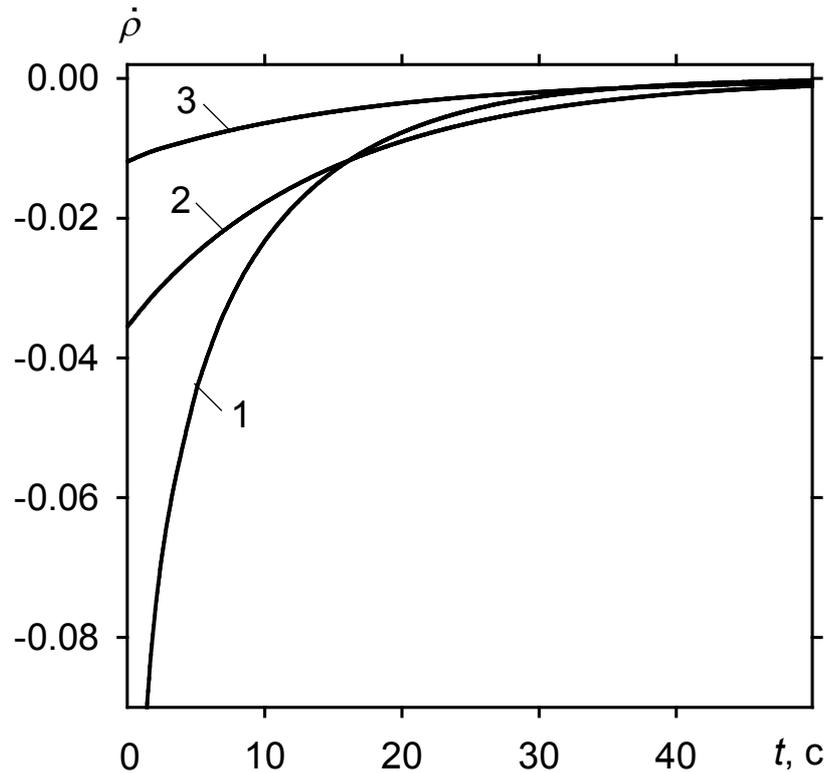


Рис. 2.17. – Скорость релаксации намагниченности для различных p
 1 – $p = 0$, 2 – $p = 0.5$, 3 – $p = 1$.

Выводы к разделу 2

В настоящем разделе была развита аналитическая теория магнитной релаксации в 2D ансамблях наночастиц с одноосной перпендикулярной анизотропией, которая принимает во внимание влияние среднего дипольного магнитного поля. Предложенный подход основан на рассмотрении каждой наночастицы как изолированной, магнитный момент \mathbf{m} которой взаимодействует с одним и тем же (в статистическом смысле) эффективным магнитным полем. Последнее включает в себя поле одноосной магнитной анизотропии, среднее дипольное поле, создаваемое всеми остальными наночастицами, а также тепловое магнитное поле, представляющее воздействие термостата с заданной абсолютной температурой. Действие термостата было аппроксимировано белым шумом.

Основываясь на стохастическом уравнении Ландау-Лифшица, описывающем стохастическую динамику выбранного магнитного момента в эффективном магнитном поле, выведено уравнение для одномерной функции распределения направлений магнитного момента. В отличие от обычного уравнения Фоккера-Планка найденное уравнение не замкнуто относительно функции распределения, поскольку содержит в качестве параметров среднее дипольное поле и интенсивности компонент эффективного теплового поля, которые в общем случае не выражаются через одномерную функцию распределения. Замыкание этого уравнения проведено в случае, когда высота потенциального барьера между равновесными направлениями магнитного момента существенно превышает тепловую энергию. С помощью замкнутого нелинейного интегродифференциального уравнения найдено обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, описывающее магнитную релаксацию данных ансамблей. Его точное решение было найдено для двух предельных случаев – для малых времён, когда большинство магнитных моментов ориентированы в первоначальном направлении, и для больших времён, когда ансамбль практически перешёл в состояние равновесия. Оба случая характеризуются различными временами релаксации, а скорость релаксации убывает со временем. Показано, что под влиянием среднего дипольного поля релаксация намагниченности в ансамблях со взаимодействием происходит быстрее, чем в случае невзаимодействующих частиц. Ускорению процесса релаксации также способствует повышение температуры и плотности упаковки ансамбля.

Предложенная модель была обобщена на случай наличия поля смещения. Показано, что в этом случае намагниченность основного состояния ансамбля зависит от величины поля смещения. Получено трансцендентное алгебраическое уравнение для определения равновесной намагниченности.

Так как данная теория основана на приближении среднего поля, имеют место следующие недостатки. Во-первых, остаётся неучтённой флуктуирующая часть эффективного магнитного поля, которая связана с тепловыми возмущениями направлений магнитных моментов. Во вторых, остаются неучтёнными

динамические корреляции направлений магнитных моментов, обусловленные дальнедействующим характером дипольного взаимодействия. Указанные недостатки не позволяют при помощи такой модели точно описывать динамику намагниченности в сильно взаимодействующих системах.

РАЗДЕЛ 3

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Актуальность численного моделирования релаксации намагниченности в таких системах обусловлена тем, что не выясненной остается роль корреляций между направлениями магнитных моментов. Ясно, что корреляционные эффекты могут качественно изменить закон релаксации благодаря антиферромагнитному характеру дальнедействующего дипольного взаимодействия. Численное моделирование позволит автоматически учесть корреляционные эффекты в силу того, что в его процессе сохраняется исчерпывающая информация об элементах ансамбля на каждом этапе. Кроме того, при численном моделировании легко проследить влияние размерных эффектов.

Однако известные методы численного моделирования, которые используются для описания таких систем, в данном случае неприменимы. Метод прямого интегрирования системы стохастических уравнений Ландау-Лифшица [90, 97, 98] требует, чтобы временной шаг был меньше периода прецессии магнитного момента ($\sim 10^{-11}$ с). Это означает, что на современном этапе развития вычислительной техники, данный метод применим лишь для описания быстрой релаксации, т.е. на релаксации временах сравнимых со временем установления квазиравновесного распределения магнитных моментов ($\sim 10^{-8}$ с) и не позволяет изучать термоиндуцированные переходы между квазиравновесными состояниями.

В случае, когда частицы имеют одноосную анизотропию, а их легкие оси направлены перпендикулярно плоскости распределения и тепловая энергия существенно меньше энергии анизотропии, данная система в определенном смысле подобна двумерной модели Изинга [105], в которой моделирование осуществляется методом Монте-Карло. Этот метод приобрел широкое распространение при изучении ансамблей ферромагнитных наночастиц [71-89, 91-93]. Однако для описания временной зависимости намагниченности его применение невозможно, так как в методе Монте-Карло изначально не предусмотрена при-

вязка к реальному времени.

Предложенные комбинированные методы имеют ряд серьёзных ограничений на область применения и для данной задачи не подходят. Так, в методе, изложенном в [99], нет достаточных теоретических оснований в выборе зависимости плотности вероятности переориентации от величины потенциального барьера. Подход [100, 101], который совмещает в себе прямое интегрирование системы стохастических уравнений и метод Монте-Карло, позволяет исследовать поведение систем наночастиц на временах до 10^{-3} с. Алгоритм [106, 107], в котором шагу Монте-Карло соответствует определенный временной интервал, дает лишь качественное представление закона релаксации, т.к. этот временной интервал определен лишь по порядку величины. Кроме того, для случая, когда энергия анизотропии существенно превышает тепловую энергию, данный метод требует огромных вычислительных затрат.

В настоящем разделе изложен принципиально новый метод моделирования, основанный на комбинированном использовании уравнения, которое позволяет по известному состоянию ансамбля в заданный момент времени определить намагниченность в следующий момент, и численной процедуры, которая определяет новое состояние системы [133, 129, 130]. Решая задачу о среднем времени достижения случайным процессом заданного уровня с использованием обратного уравнения Фоккера-Планка, было получено точное квадратурное выражение для плотности вероятности переориентации магнитного момента, находящегося в дипольном поле, создаваемом его окружением. В случае, когда энергия анизотропии существенно превышает тепловую энергию, а поле анизотропии больше максимального дипольного поля в системе, плотность вероятности переориентации была аппроксимирована приближенной формулой. Показано, что в случае замены всех локальных дипольных полей их усреднённым значением, результаты совпадают с приближением среднего поля, изложенным в предыдущем разделе.

3.1. Теоретическое обоснование алгоритма

Рассмотрим систему одинаковых сферических ферромагнитных наночастиц радиуса r . Предполагаем, что центры частиц расположены в узлах квадратной решетки размером $Ld \times Ld$ [$(L + 1)^2 = N$] и периодом d ($\geq 2r$), легкие оси намагниченности наночастиц перпендикулярны плоскости распределения xy и в момент времени $t = 0$ магнитные моменты $\mathbf{m}_i(t)$ всех частиц ориентированы вдоль оси z . Вероятность размещения наночастицы в узле $p = 1$. Наглядное представление модели аналогично приведенной на рисунке 2.2, однако в данном случае все узлы решётки заняты наночастицами. Так же предполагаем, что минимальная величина ΔU_i потенциального барьера между равновесными направлениями любого магнитного момента \mathbf{m}_i существенно превышает тепловую энергию $k_B T$, или условие $\varepsilon_i = \Delta U_i / k_B T \gg 1$ выполняется для всех наночастиц.

1.3.1. Уравнение для приведенной намагниченности

При условии $\varepsilon_i \gg 1$ вектор магнитного момента $\mathbf{m}_i(t)$ флуктуирует в малой окрестности вокруг положительного или отрицательного направления оси z и только изредка переориентируются. Это значит, что для любого момента времени t средние числа положительно и отрицательно направленных магнитных моментов, $N_+(t)$ и $N_-(t)$ являются известными. Поскольку число частиц, которые в момент времени t находятся в процессе переориентации, много меньше N , выполняется соотношение $N_+(t) + N_-(t) \approx N$ и приведенная намагниченность ансамбля наночастиц может быть записана как $\rho(t) = 2N_+(t)/N - 1$. Определим теперь состояние ансамбля. Исходим из того, что состояние ансамбля в момент времени t является известным, если известны направления магнитных моментов всех наночастиц, т.е. состояние системы описывается набором знаков $\sigma_i \equiv \sigma_i(t)$ ($i = 1, \dots, N$), где $\sigma_i(t) = +$ или $-$ в зависимости от ориентации магнитного момента $\mathbf{m}_i(t)$ относительно оси z .

Если известно состояние ансамбля, то, пренебрегая флуктуациями $\mathbf{m}_i(t)$ и принимая во внимание, что в период между переориентациями выполняется приближительное соотношение $\mathbf{m}_i(t) = \sigma_i m \mathbf{e}_z$, локальное дипольное поле, действующее на магнитный момент $\mathbf{m}_j(t)$, определяется как $\mathbf{h}_j(t) = h_j(t) \mathbf{e}_z$, где

$$h_j(t) = -m \sum_{i \neq j} \sigma_i \frac{1}{r_{ij}^3}. \quad (3.1)$$

Если в момент времени магнитные моменты не претерпевают переориентацию, то каждая наночастица находится под воздействием локального дипольного поля (3.1). Но даже если часть магнитных моментов меняют свое направление, формула (3.1) остается приближенно справедливой, т.к. $\varepsilon_j \gg 1$ и число переориентаций много меньше N . Это означает, что в пределах некоторого малого временного интервала мы можем рассматривать ансамбль взаимодействующих наночастиц как систему изолированных магнитных моментов, каждый из которых находится в собственном внешнем магнитном поле $\mathbf{h}_j(t)$. Как будет показано позже, этот факт позволяет существенно упростить построение алгоритма численного моделирования магнитной релаксации в рассматриваемых системах.

Предположим, что плотности вероятности $w_{\sigma_j}(t; j)$ переориентации вектора $\mathbf{m}_j(t)$ ($j = 1, \dots, N$) из положительного направления относительно оси z ($\sigma_j = +$) и из отрицательного ($\sigma_j = -$) являются известными. Также предполагаем, что интервал $(t, t + \tau)$ достаточно мал, и вероятностью двух и более переориентаций одного магнитного момента можно пренебречь. Приняв во внимание, что величина $N_+(t + \tau) - N_+(t)$ равна разности между количеством переориентаций из отрицательного направления в положительное и количеством обратных переориентаций, получаем

$$\rho(t + \tau) - \rho(t) = -\frac{2\tau}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j w_{\sigma_j}(t; j). \quad (3.2)$$

Отметим, что плотности вероятностей $w_{\sigma_j}(t; j)$ зависят от локальных полей $h_j(t)$, и уравнение (3.2) применимо лишь, когда известно состояние ансамбля в момент времени t . Формула (3.2) позволяет получить новое значение намагниченности в следующий момент времени $t + \tau$, однако с её помощью нельзя установить новое состояние ансамбля для момента времени $t + \tau$. Для того, чтобы использовать (3.2) в качестве рекуррентного соотношения для вычисления закона релаксации, необходимо определить значения $w_{\sigma_j}(t; j)$ и разработать процедуру нахождения нового состояния системы в момент времени $t + \tau$, если известно состояние в момент времени t . Сначала определим плотность вероятности переориентации в зависимости от величины локального дипольного поля.

1.3.2. Плотность вероятности переориентации

Плотность вероятности переориентации, согласно определению, задаётся выражением $w_{\sigma_j}(t; j) = 1/t_s^{\sigma_j}(t; j)$, где $t_s^{\sigma_j}(t; j)$ – среднее время пребывания магнитного момента $\mathbf{m}_j(t)$ в положительном ($\sigma_j = +$) или отрицательном ($\sigma_j = -$) направлении. Эту величину можно представить как $t_s^{\sigma_j}(t; j) = 2t_m^{\sigma_j}(t; j)$, где $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ – среднее время, за которое энергия W_j магнитного момента $\mathbf{m}_j(t)$ впервые достигнет своего максимального значения, а множитель 2 учитывает тот факт, что из состояния с максимальной энергией магнитный момент $\mathbf{m}_j(t)$ может перейти в одно из устойчивых состояний ($\sigma_j = +$ или $\sigma_j = -$) с вероятностью 0.5. В данном случае энергия W_j включает энергию анизотропии, $-(H_a/2m)m_{jz}^2(t)$ и энергию Зеемана $-h_j(t)m_{jz}(t)$. Учитывая осевую симметрию, выражение для W_j принимает вид

$$W_j \equiv W_j(\theta_j(t), t) = -\frac{1}{2} H_a m [\cos^2 \theta_j(t) + 2b_j(t) \cos \theta_j(t)]. \quad (3.3)$$

Здесь $\theta_j(t)$ – полярный угол вектора $\mathbf{m}_j(t)$ и $b_j(t) = h_j(t)/H_a$. Следуя предпо-

ложению, что каждый магнитный момент имеет два равновесных направления, считаем, что отношение $|b_j(t)| < 1$ справедливо для всех j . Состояние, соответствующее максимальной энергии W_j магнитного момента $\mathbf{m}_j(t)$, определяется полярным углом

$$\Omega_j(t) = \arccos[-b_j(t)]. \quad (3.4)$$

С математической точки зрения вычисление среднего времени $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ – есть частный случай задачи, известной в теории Марковских процессов как задача о достижении случайным процессом заданного уровня [109]. В нашем случае Марковским процессом является вектор $\mathbf{m}_j(t)$, а заданный уровень – конечная поверхность, определяемая формулой (3.4). Динамику магнитного момента описывает стохастическое уравнение Ландау-Лифшица

$$\dot{\mathbf{m}}_j = -\gamma \mathbf{m}_j \times [\mathbf{H}_j + \zeta_j(t)] - (\lambda\gamma/m) \mathbf{m}_j \times (\mathbf{m}_j \times \mathbf{H}_j), \quad (3.5)$$

где

$$\mathbf{H}_j \equiv -\frac{\partial W_j(t)}{\partial \mathbf{m}_j} = H_a [\cos\theta_j(t) + b_j(t)] \mathbf{e}_z. \quad (3.6)$$

Если рассматривать локальные дипольные поля $\mathbf{h}_j(t)$ как внешние, действующие независимо друг от друга, то можно считать, что наночастицы не взаимодействуют друг с другом. В этом случае стохастические уравнения (3.5) являются независимыми, и каждый магнитный момент может быть описан отдельно. Пусть $P_j = P_j(\mathcal{G}_j, t | \mathcal{G}'_j, t')$ – плотность вероятности того, что $\theta_j(t) = \mathcal{G}_j$ при условии, что $\theta_j(t') = \mathcal{G}'_j (t \geq t')$. Отметим, что в случае осевой симметрии P_j не зависит от азимутального угла φ_j . Используя интерпретацию Стратоновича [126] уравнения (3.5) и применяя стандартный метод [109], можно записать прямое уравнение Фоккера-Планка для плотности вероятности P_j

$$\frac{\partial P_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \vartheta_j} \left[\frac{\lambda \gamma}{m} \frac{\partial W_j(\vartheta_j, t)}{\partial \vartheta_j} - \Delta \gamma^2 \cot \vartheta_j \right] P_j + \Delta \gamma^2 \frac{\partial^2 P_j}{\partial \vartheta_j^2} \quad (3.7)$$

и обратное уравнение

$$\frac{\partial P_j}{\partial t'} = \left[\frac{\lambda \gamma}{m} \frac{\partial W_j(\vartheta'_j, t')}{\partial \vartheta'_j} - \Delta \gamma^2 \cot \vartheta'_j \right] \frac{\partial P_j}{\partial \vartheta'_j} - \Delta \gamma^2 \frac{\partial^2 P_j}{\partial \vartheta'^2_j}. \quad (3.8)$$

Как правило, изучение магнитных свойств ансамблей наночастиц основано на прямом уравнении Фоккера-Планка (3.7), которое позволяет представить статистические характеристики ансамбля как функции времени t . В то же время, обратное уравнение (3.8) оказывается очень полезным для описания термоиндуцированных переходов магнитных моментов из одного устойчивого состояния в другое [59]. Здесь используется обратное уравнение Фоккера-Планка (3.8) для вычисления среднего времени $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ достижения магнитным моментом $\mathbf{m}_j(t)$ угла $\Omega_j(t)$.

Чтобы использовать уравнение (3.2) как рекуррентное соотношение для нахождения приведенной намагниченности в дискретные моменты времени $t = t_n$ ($n = 0, 1, \dots, M, t_0 = 0, t_{n+1} > t_n$), необходимо вычислить время $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ для $n = 0, 1, \dots, M - 1$. Поскольку каждому моменту времени t_n соответствует угол $\Omega_j(t_n)$, в уравнении (3.8) необходимо провести следующую замену: $W_j(\vartheta'_j, t') = W_j(\vartheta'_j, t_n)$. Иначе говоря, для нахождения $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ нужно использовать (3.8) с энергией $W_j(\vartheta'_j, t')$, не зависящей от времени t' . Это важное условие позволяет рассмотреть случайный процесс $\theta_j(t)$ как однородный: $P_j(\vartheta_j, t | \vartheta'_j, t') = P_j(\vartheta_j, t - t' | \vartheta'_j, 0)$, что существенно упрощает задачу.

Для вычисления времени $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ введем среднее время $T_j = T_j^{\sigma_j}(\vartheta'_j; t_n)$, необходимое для того, чтобы угол $\theta_j(t)$ ($\theta_j(0) = \vartheta'_j, \vartheta'_j \in (0, \Omega_j(t_n))$ если $\sigma_j = +$ и $\vartheta'_j \in (\Omega_j(t_n), \pi)$, если $\sigma_j = -$), впервые достиг значения $\Omega_j(t_n)$. Искомая величина $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ выражается через T_j как

$$t_m^{\sigma_j}(t; j) = T_j^{\sigma_j}(\pi(1 - \sigma_j \cdot 1)/2; t_n), \quad (3.9)$$

а величина T_j задается выражением

$$T_j = \int_0^\infty du \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\vartheta_j P_j(\vartheta_j, u | \vartheta'_j, 0). \quad (3.10)$$

где $\theta_1 = \Omega_j(t_n) (1 - \sigma_j \cdot 1)$;

$$\theta_2 = \pi(1 - \sigma_j \cdot 1)/2 + \Omega_j(t_n) (1 + \sigma_j \cdot 1)/2.$$

Проинтегрируем обе части уравнения (3.8) по $u = t - t'$ и по $\vartheta = \vartheta_j$, таким же образом, как и в (3.10)

$$\int_0^\infty du \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\vartheta_j \frac{\partial P_j}{\partial t'} = \int_0^\infty du \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\vartheta_j \left[\left(\frac{\lambda\gamma}{m} \frac{\partial W_j(\vartheta'_j, t')}{\partial \vartheta'_j} - \Delta\gamma^2 \cot \vartheta'_j \right) \frac{\partial P_j}{\partial \vartheta'_j} - \Delta\gamma^2 \frac{\partial^2 P_j}{\partial \vartheta_j'^2} \right]. \quad (3.11)$$

Учитывая условие однородности $P_j(\vartheta_j, t | \vartheta'_j, t') = P_j(\vartheta_j, t - t' | \vartheta'_j, 0)$, начальные условия $P_j(\vartheta_j, 0 | \vartheta'_j, 0) = \delta(\vartheta_j - \vartheta'_j)$, а также условие сходимости плотности вероятности $P_j(\vartheta_j, u | \vartheta'_j, 0) \rightarrow 0$ при $u \rightarrow \infty$, левая часть последнего выражения преобразуется следующим образом

$$\int_0^\infty du \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\vartheta_j \frac{\partial P_j}{\partial t'} = - \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\vartheta_j \delta(\vartheta_j - \vartheta'_j) = -1.$$

Продифференцировав (3.3) по полярному углу выбранной наночастицы ϑ_j и подставив полученный результат в (3.11), учитывая (3.10), получим следующее обыкновенное дифференциальное уравнение для величины T_j :

$$\frac{d^2 T_j}{d\vartheta_j'^2} + \left[\cot \vartheta'_j - 2a(b_j(t_n) + \cos \vartheta'_j) \sin \vartheta'_j \right] \frac{dT_j}{d\vartheta'_j} = -at_r. \quad (3.12)$$

Для нахождения единственного решения уравнения (3.12) необходимо наложить два граничных условия на время T_j . Первое условие следует непо-

средственно из определения: $T_j|_{\vartheta'_j=\Omega_j(t_n)} = 0$. Второе условие найдем из анализа решения (3.12) для малой окрестности угла $\vartheta'_j = 0$ и $\vartheta'_j = \pi$. В этих случаях уравнение (3.12) существенно упрощается

$$\frac{d^2 T_j}{d\vartheta'_j{}^2} + \frac{1}{\vartheta'_j - \pi(1 - \sigma_j \cdot 1)/2} \frac{dT_j}{d\vartheta'_j} = -at_r. \quad (3.13)$$

Выражение (3.13) легко сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка [131], проинтегрировав решение которого получим

$$T_j = c_j \ln|\vartheta'_j - \pi(1 - \sigma_j \cdot 1)/2| + d_j - at_r[\vartheta'_j - \pi(1 - \sigma_j \cdot 1)]^2/4, \quad (3.14)$$

где c_j, d_j – константы интегрирования.

Поскольку T_j – величина ограниченная, должно выполняться условие $c_j = 0$, которое может быть представлено также в виде второго граничного условия: $dT_j/d\vartheta'_j|_{\vartheta'_j=\pi(1-\sigma_j \cdot 1)/2} = 0$. Такое граничное условие соответствует поглощающей границе, а граничное условие $T_j|_{\vartheta'_j=\Omega_j(t_n)} = 0$ – отражающей границе [109].

Уравнение (3.12) является обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка и решается стандартным способом. Введем обозначения $\vartheta'_j = \vartheta$, $b_j(t_n) = b$, $\sigma_j = \sigma$ и осуществим замену $dT_j/d\vartheta = Z$, тогда (3.12) переписывается в виде

$$Z' + q(\vartheta)Z = -at_r, \quad (3.15)$$

где

$$q(\vartheta) = \cot \vartheta - 2a(b + \cos \vartheta)\sin \vartheta. \quad (3.16)$$

Решая (3.15) методом вариации произвольной постоянной [131], представим Z в виде

$$Z = C_1(\vartheta)\exp(-\int q(\vartheta)d\vartheta), \quad (3.17)$$

где

$$C_1(\vartheta) = -at_r \int_{\vartheta}^{\vartheta_0} \exp\left(\int q(y)dy\right)dy + C_1 \quad (3.18)$$

находится подстановкой (3.17) в (3.15).

Постоянную C_1 будем искать из граничного условия $Z|_{\vartheta=\pi(1-\sigma_j)/2} = 0$. С учетом (3.18) и равенств

$$\begin{aligned} \int_{\vartheta}^{\vartheta_0} \exp\left(\int q(y)dy\right)dy &= -\int_x^{x_0} \exp[a(2by + y^2)]dy \\ \exp\left(-\int q(x)dx\right) &= \frac{\exp[-a(2bx + x^2)]}{\sqrt{1-x^2}}, \end{aligned}$$

где $x = \cos \vartheta$, $x_0 = \cos \vartheta_0$, $y \equiv \cos y$;

перепишем (3.17) как

$$Z = \left(at_r \int_x^{x_0} e^{-ab^2} e^{a(y+b)^2} dy + C_1 \right) \frac{e^{ab^2} e^{-a(x+b)^2}}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (3.19)$$

Подставив в правую часть $x = \cos(\pi(1 - \sigma \cdot 1)/2) = \sigma$ и приравняв полученное выражение к 0, найдем C_1

$$C_1 = at_r e^{-ab^2} \int_{\sigma}^{x_0} e^{a(y+b)^2} dy. \quad (3.20)$$

Тогда окончательный вид решения (3.15) будет

$$Z = at_r \frac{e^{-a(x+b)^2}}{\sqrt{1-x^2}} \int_x^{\sigma} e^{a(y+b)^2} dy. \quad (3.21)$$

Для нахождения T_j проинтегрируем выражение (3.21) по ϑ

$$T_j = \int_{\vartheta}^{\vartheta_0} Z d\vartheta + C_2 = -at_r \int_{\cos \vartheta}^{\cos \vartheta_0} \frac{e^{-a(x+b)^2}}{1-x^2} \int_x^{\sigma} e^{a(y+b)^2} dy dx + C_2. \quad (3.22)$$

Найдя константу интегрирования C_2 из граничного условия $T_j|_{\vartheta=\arccos(-b)} = 0$,

$$C_2 = at_r \int_{-b}^{\cos \vartheta_0} \frac{e^{-a(x+b)^2}}{1-x^2} \int_x^\sigma e^{a(y+b)^2} dy dx, \quad (3.23)$$

решение уравнения (3.12) представляем в виде

$$T_j = at_r \int_{-b}^{\cos \vartheta} \frac{e^{-a(x+b)^2}}{1-x^2} \int_x^\sigma e^{a(y+b)^2} dy dx. \quad (3.24)$$

Учитывая выражение (3.9), проводя замену переменных $x \equiv \sigma x$, $y \equiv \sigma y$ и вернувшись к прежним обозначениям, получаем строгое выражение для среднего времени $t_m^{\sigma_j}(t; j)$ достижения магнитным моментом $\mathbf{m}_j(t)$ угла $\Omega_j(t)$.

$$t_m^{\sigma_j}(t_n; j) = at_r \int_{-\sigma_j b_j(t_n)}^1 dx \frac{\exp[-a(x + \sigma_j b_j(t_n))^2]}{1-x^2} \int_x^1 dy \exp[a(y + \sigma_j b_j(t_n))^2], \quad (3.25)$$

которое справедливо для произвольных a и $|b_j(t)| < 1$. Используя выражение (3.25), вычислим плотность вероятности $w_{\sigma_j}(t; j) = 1/t_m^{\sigma_j}(t; j)$ для $\varepsilon_j \gg 1$. Согласно уравнению (3.3), высота потенциального барьера $\Delta U_j^{\sigma_j}(t)$ между равновесными направлениями магнитного момента $\mathbf{m}_j(t)$ может быть записана в виде $\Delta U_j^{\sigma_j}(t) = \frac{1}{2} H_a m [1 + \sigma_j b_j(t)]^2$, и, поскольку, $\Delta U_j(t) = \min \Delta U_j^{\sigma_j}(t)$, условие $\varepsilon_j \gg 1$ имеет следствием $a[1 + \sigma_j b_j(t_n)]^2 \gg 1$.

Для последнего условия точное выражение (3.25) может быть значительно упрощено. Вычислим сначала внутренний интеграл. Осуществим замену переменной интегрирования $y = l + 1$. Если считать, что $a \rightarrow \infty$, при $l < 1$ справедливым будет следующее выражение $\exp[a(y + \sigma_j b_j(t_n))^2] \approx \exp[a(1 + \sigma_j b_j(t_n))^2] + 2a(1 + \sigma_j b_j(t_n)) l$. Таким образом,

$$\int_x^1 dy \exp[a(y + \sigma_j b_j(t_n))^2] = \exp[a(1 + \sigma_j b_j(t_n))^2] \int_0^{1-x} dl \exp[-2a(1 + \sigma_j b_j(t_n)) l].$$

Поскольку $x < 1$, то вкладом верхнего предела в последний интеграл можно пренебречь. В результате получим следующее асимптотическое выражение:

$$\int_x^1 dy \exp[a(y + \sigma_j b_j(t_n))^2] = \frac{\exp[a(1 + \sigma_j b_j(t_n))^2]}{2a[1 + \sigma_j b_j(t_n)]}.$$

Величина второго интеграла в (3.25) при условии $a[1 + \sigma_j b_j(t_n)]^2 \rightarrow \infty$ определяется нижним пределом и может быть представлена как

$$\int_{-\sigma_j b_j(t_n)}^1 dx \frac{\exp[-a(x + \sigma_j b_j(t_n))^2]}{1 - x^2} = \frac{1}{1 - b_j^2(t_n)} \int_0^{1 + \sigma_j b_j(t_n)} dy e^{-ay^2}.$$

Устремив верхний предел к бесконечности, получим интеграл Пуассона, который равен $0.5\sqrt{\pi/a}$. Таким образом

$$\int_{-\sigma_j b_j(t_n)}^1 dx \frac{\exp[-a(y + \sigma_j b_j(t_n))^2]}{1 - x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{1 - b_j^2(t_n)}.$$

Тогда при $a[1 + \sigma_j b_j(t_n)]^2 \rightarrow \infty$, плотность вероятности переориентации магнитного момента m_j определяется следующим выражением:

$$w_{\sigma_j}(t_n; j) = \frac{2}{t_r} \sqrt{\frac{a}{\pi}} [1 - b_j^2(t_n)][1 + \sigma_j b_j(t_n)] \exp[-a(1 + \sigma_j b_j(t_n))^2]. \quad (3.26)$$

Важно отметить, что результат (3.26) следует так же из работы Брауна [56] для изолированных наночастиц, находящихся во внешнем поле, направленном вдоль легких осей. В работе [56] выражение (3.26) было получено путем решения прямого уравнения Фоккера-Планка при условии $\varepsilon_j \gg 1$. Таким образом, в настоящей диссертации предлагается альтернативный метод определения плотности вероятности $w_{\sigma_j}(t; j)$, основанный на обратном уравнении Фоккера-Планка в рамках задачи о достижении случайным процессом заданного уровня. Преимущество такого подхода состоит в том, что выражение для плотности вероятности $w_{\sigma_j}(t; j)$ можно определить для произвольного значения ε_j , используя (3.25).

Если условие $\varepsilon_j \gg 1$ сохраняется для всех наночастиц ансамбля в момент

времени $t = t_n$, то для такого момента времени можно определить дипольные поля, действующие на каждую наночастицу, используя выражение (3.1) и, соответственно, определить плотности вероятности переориентации каждого магнитного момента, используя формулу (3.26).

Нетрудно увидеть, что если заменить локальные дипольные поля средним полем, действующим на все наночастицы ансамбля, выражение (3.2) переходит в среднеполевой закон релаксации (2.50). В этом случае в уравнении (3.26) переменная $b_j(t)$ заменяется на величину $b(t)$, соответствующую приближению среднего поля (2.52), и, следовательно, $w_{\sigma_j}(t; j) = 1/t_s^{\sigma_j}(t; j)$ заменяется на $w_{\sigma}(t) = 1/t_s^{\sigma}(t)$, где $t_s^{\sigma}(t)$ соответствует (2.51). Это означает, что плотность вероятности переворота магнитного момента будет одной и той же для всех магнитных моментов одного направления. Далее, учитывая, что $\sum_j \sigma_j = N_+(t) - N_-(t)$, $\rho(t) = (N_+(t) - N_-(t))/N$, а $N_+(t) - N_-(t) = N$ и условия $\tau \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, из (3.2) получается временная зависимость намагниченности в приближении среднего поля (2.50).

Таким образом, было получено строгое выражение для плотности вероятности переориентации магнитного момента наночастицы в дипольном поле, создаваемом его окружением. В отличие от закона Аррениуса-Нееля (1.4), в выражении (3.26) предэкспоненциальный множитель зависит от величины дипольного поля.

1.3.3. Влияние поля смещения на вероятность переориентации

При построении среднеполевой теории магнитной релаксации двумерных ансамблей наночастиц было показано, что поле смещения, т.е. поле, направленное вдоль лёгких осей частиц, является важным фактором, определяющим динамику намагниченности ансамбля. Однако, игнорирование динамических корреляций направлений магнитных моментов приближением среднего поля может существенно исказить степень воздействия внешнего поля на систему,

особенно в случае большой плотности упаковки наночастиц. В случае, когда суммарное дипольное внешнее поля не превышают поля анизотропии для магнитного момента любой наночастицы, т.е. не нарушается предположение о двух устойчивых состояниях, поле смещения легко учесть в рамках метода, разработанного в предыдущем пункте. Энергия j -ой наночастицы во внешнем поле будет определяться как [132]

$$W'_j \equiv W'_j(\theta_j(t), t) = -\frac{1}{2} H_a m [\cos^2 \theta_j(t) + 2B_j(t) \cos \theta_j(t)], \quad (3.27)$$

где $B_j(t) = (h_j(t) + H_0)/H_a$.

Следуя предположению, что каждый магнитный момент имеет два равновесных направления, полагаем, что отношение $|B_j(t)| < 1$ справедливо для всех j . Состояние, соответствующее максимальной энергии W_j магнитного момента $\mathbf{m}_j(t)$, определяется полярным углом

$$\Omega'_j(t) = \arccos[-B_j(t)] \quad (3.28)$$

Далее записав обратное уравнение Фоккера-Планка, аналогичное (3.8), с помощью вышеописанной методики, получаем среднее время достижения магнитным моментом m_j , находящимся в дипольном поле окружения $h_j(t)$ и во внешнем поле H_0 , конической поверхности, определяемой выражением (3.28)

$$t_m^{\sigma_j}(t_n; j) = at_r \int_{-\sigma_j B_j(t_n)}^1 dx \frac{\exp[-a(x + \sigma_j B_j(t_n))^2]}{1 - x^2} \int_x^1 dy \exp[a(y + \sigma_j B_j(t_n))^2]. \quad (3.29)$$

При условии $a[1 + \sigma_j B_j(t_n)]^2 \rightarrow \infty$ плотность вероятности переориентации магнитного момента m_j имеет следующий вид:

$$w_{\sigma_j}(t_n; j) = \frac{2}{t_r} \sqrt{\frac{a}{\pi}} [1 - B_j^2(t_n)] [1 + \sigma_j B_j(t_n)] \exp[-a(1 + \sigma_j B_j(t_n))^2]. \quad (3.30)$$

Таким образом, оставаясь в пределах изложенного подхода, легко учесть влияние поля смещения на динамику намагниченности ансамбля наночастиц.

3.2. Алгоритм вычислений

Следуя результатам предыдущего подраздела, для вычисления закона магнитной релаксации в некотором интервале $(0, t_M)$ необходимо знать состояния ансамбля наночастиц в некоторые дискретные моменты времени $t = t_n$ ($n = 1, 2, \dots, M - 1$) [129, 133, 134]. Состояние для $n = 0$, т.е. для $t = 0$, определяется начальным условием $\sigma_j(0) = +$ для всех j . Для нахождения состояния в следующий момент времени по известному предыдущему, необходимо проделать следующее. Будем считать, что известно состояние ансамбля в момент времени $t = t_n$. Это значит, что множество $A_+(t_n)$, содержащее номера j положительно направленных магнитных моментов ($\sigma_j(t_n) = +$) и множество $A_-(t_n)$, содержащее номера j отрицательно направленных магнитных моментов ($\sigma_j(t_n) = -$) полностью определены. Ясно, что множество $A_+(t_n)$ содержит $N_+(t_n)$ элементов, а множество $A_-(t_n) - N_-(t_n)$ элементов.

Далее предполагая, что интервал $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$ достаточно мал, определим среднее число переориентаций магнитных моментов

$$v_{\pm}(t_n, t_{n+1}) = \Delta t_{n+1} \sum_{j \in A_{\pm}(t_n)} w_{\pm}(t_n; j), \quad (3.31)$$

которые имеют место на временном интервале Δt_{n+1} для множеств положительно направленных (знак плюс) и отрицательно направленных (знак минус) магнитных моментов. Другими словами, уравнение (3.31) справедливо в случае выполнения следующего неравенства $\Delta t_{n+1} \max\{w_{\pm}(t_n; j)\} \ll 1$. В отдельных случаях это может потребовать значительных вычислительных затрат, поэтому целесообразно (3.31) заменить следующим приближенным соотношением:

$$v_{\pm}(t_n, t_{n+1}) = \sum_{j \in A_{\pm}(t_n)} Y(\Delta t_{n+1} w_{\pm}(t_n; j)), \quad (3.32)$$

где $Y(x) = x$, если $x < 1$ и $Y(x) = 1$, если $x \geq 1$.

Данное выражение справедливо, если выполняется более слабое условие $v_{\pm}(t_n, t_{n+1}) \ll N$. С учетом (3.32), уравнение (3.2) может быть записано в виде

$$\rho(t_{n+1}) = \rho(t_n) - \frac{2}{N} [v_+(t_n, t_{n+1}) - v_-(t_n, t_{n+1})]. \quad (3.33)$$

Выражения (3.33), (3.32), (3.26) и (3.1) позволяют вычислить приведенную намагниченность в момент времени $t = t_{n+1}$, если известно состояние ансамбля в момент времени $t = t_n$. Однако, вычислив количество изменений в системе за время Δt_{n+1} , мы не можем с помощью этих выражений получить информацию о том, где эти изменения произошли. Это значит, что новое состояние останется неопределенным и осуществление очередной итерации для момента времени t_{n+1} не представляется возможным. Поэтому для моделирования релаксации необходимо вместе с (3.33), (3.32), (3.26) и (3.1) использовать некоторый механизм внесения изменений в систему, т.е. необходима процедура получения нового состояния ансамбля. Фактически данная процедура является моделированием действия теплового поля на систему и, поэтому, она должна воспроизводить его случайный характер. Естественно предположить, что в системе преимущественно будут осуществлены перевороты в тех узлах, которым соответствуют наибольшие плотности вероятности $w_{\pm}(t_n; j)$, однако не исключается возможность переворотов, вероятность которых минимальна. В данной работе предлагается простой в реализации и удовлетворяющий этому требованию механизм выбора узлов, в которых произойдут.

Сначала определим временной интервал Δt_{n+1} . Так как количество переориентирующихся в единицу времени магнитных моментов убывает со временем в силу уменьшения (в среднем) локальных дипольных полей, действующих на наночастицы, для обеспечения приблизительно равного по числу переворотов вклада каждой итерации, имеет смысл ввести переменную величину шага Δt_{n+1} . Это позволит существенно сократить вычислительные затраты. Анализ показал, что в подавляющем большинстве случаев на начальном этапе релаксации плотности вероятности $w_{\pm}(t_n; j)$ по порядку величины совпадают со значением, полученным в приближении среднего поля $w_{\pm}(t_n)$, а на заключительном этапе $w_{\pm}(t_n; j) \ll w_{\pm}(t_n)$. Для минимизации числа итераций без существенных потерь в точности будем выбирать Δt_{n+1} следующим образом:

$$\Delta t_{n+1} = \eta [w_+(t_n) + w_-(t_n)]^{-1}, \quad \eta \ll 1. \quad (3.34)$$

При этом точность алгоритма нахождения закона магнитной релаксации, как и в любой другой разностной схеме второго порядка точности, будет определяться второй степенью параметра η , задающего шаг дискретизации. Следовательно, с уменьшением η зависимость закона релаксации от величины η становится всё более слабой. В данной работе принималось $\eta = [0.01 \dots 0.005]$.

Зная величину Δt_{n+1} , можем определить вероятность переворота каждого положительно направленного магнитного момента как $\Delta t_{n+1} w_+(t_n; j)$ и, используя (3.32), можно найти среднее число переворотов, которые имеют место за это время

$$v_+(t_n, t_{n+1}) = r_+(t_n, t_{n+1}) + \Delta t_{n+1} \sum_{j \in A'_+(t_n)} w_+(t_n; j), \quad (3.35)$$

где $r_+(t_n, t_{n+1})$ – число узлов решетки, для которых выполняется условие

$$\Delta t_{n+1} w_+(t_n; j) \geq 1;$$

$A'_+(t_n)$ – подмножество $A_+(t_n)$, для всех элементов которого выполняется условие $\Delta t_{n+1} w_+(t_n; j) < 1$;

Поскольку величина $v_+(t_n, t_{n+1})$, вычисленная из (3.35), может быть дробной, введем число переориентаций $n_+(t_n, t_{n+1})$ в виде

$$n_+(t_n, t_{n+1}) = [v_+(t_n, t_{n+1})] + I \quad (3.36)$$

где $[v_+(t_n, t_{n+1})]$ – целая часть $v_+(t_n, t_{n+1})$;

$I = [1, 0]$ с вероятностями $p_1 = v_+(t_n, t_{n+1}) - [v_+(t_n, t_{n+1})]$ и $p_0 = 1 - p_1$ соответственно.

Величину $n_+(t_n, t_{n+1})$ находим с использованием генератора случайных чисел.

Среди $n_+(t_n, t_{n+1})$ магнитных моментов, которые должны переориентироваться к моменту времени t_{n+1} , $r_+(t_n, t_{n+1})$ магнитных моментов инвертируются в обязательном порядке в узлах, для которых выполняется условие $\Delta t_{n+1} w_+(t_n; j) \geq 1$ (напомним, что каждому номеру j соответствует узел решетки). Чтобы найти

оставшиеся $n_+(t_n, t_{n+1}) - r_+(t_n, t_{n+1})$ узлов решетки, в которых должны произойти перевороты, разместим плотности вероятности переворота магнитных моментов в этих узлах $w_+(t_n; j)$ на интервале $[0, \sum_{j \in A'_+(t_n)} w_+(t_n; j)]$, как показано на рисунке 3.1. Ясно, что этот интервал будет содержать $N_+(t_n, t_{n+1}) - r_+(t_n, t_{n+1})$ подинтервалов.

Генератором равномерной случайной величины генерируем случайное число x на этом отрезке. Выбранным считается тот узел j , которому соответ-

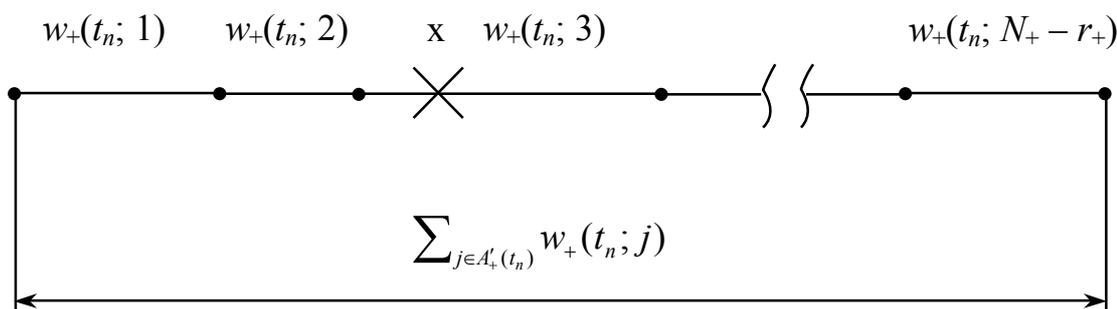


Рис. 3.1. – К выбору узла, в котором произойдет переориентация магнитного момента.

ствует подинтервал $w_+(t_n; j)$, содержащий число x (на рисунке 3.1 $j = 3$). Запоминаем соответствующий узел j и формируем новый интервал аналогично предыдущему, но не включая в него уже выбранный подинтервал. Повторив это действие $n_+(t_n, t_{n+1}) - r_+(t_n, t_{n+1})$ раз, запоминая и исключая из рассмотрения уже выбранные узлы, мы реализуем оставшиеся перевороты, которые должны произойти за время Δt_{n+1} .

Проделав всю вышеизложенную процедуру для среднего числа переориентаций $\nu_-(t_n, t_{n+1})$ магнитных моментов из отрицательного направления в положительное, мы определим $n_-(t_n, t_{n+1})$ узлов решетки, в которых должны произойти эти перевороты за время Δt_{n+1} . Поскольку известно состояние ансамбля в момент времени $t = t_n$, состояние ансамбля в момент времени $t = t_{n+1}$ может быть так же найдено, осуществив $n_+(t_n, t_{n+1}) + n_-(t_n, t_{n+1})$ инверсий магнитных моментов в выбранных узлах. Аналогично можем найти состояние системы в момент времени

$t = t_{n+2}$, используя в качестве начальных условий результат предыдущей итерации.

Если состояние ансамбля наночастиц в момент времени $t = 0$ известно, то применяя данный алгоритм, мы можем найти состояния системы для дискретного набора моментов времени $t = t_n$ ($n = 1, \dots, M - 1$). Так как данный алгоритм носит вероятностный характер – т.е. каждая реализация такого численного эксперимента будет давать свою эволюцию системы с пренебрежимо малой вероятностью повторения – приведенная намагниченность, вычисленная по формуле (3.33), является случайной величиной. Численным экспериментом считается однократное применение алгоритма, описанного выше, результатом которого есть дискретный набор значений приведенной намагниченности. Обозначим величину приведенной намагниченности в k -ом численном эксперименте на n -ом шаге как $\rho_{sim}^k(t_n)$. Тогда искомый закон магнитной релаксации есть набор усредненных значений приведенной намагниченности

$$\rho_{sim}(t_n) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \rho_{sim}^k(t_n), \quad (3.37)$$

где K – количество численных экспериментов.

Еще раз подчеркнем, что данный метод использует точные значения локальных дипольных полей в дискретные моменты времени, в промежутках между которыми поля считаются постоянным. Последнее предположение является справедливым, если за этот промежуток времени дипольные поля не претерпевают значительных изменений, т.е. количество переориентаций магнитных моментов много меньше общего числа наночастиц.

Выводы к разделу 3

В данном подразделе был разработан новый метод численного моделирования термоиндуцированной магнитной релаксации в 2D ансамблях одноосных ферромагнитных наночастиц. Метод основан на точном аналитическом определении плотностей вероятности переориентации магнитного момента и численном определении состояния ансамбля для дискретных моментов времени.

Получено аналитическое выражение для нахождения приращения намагниченности ансамбля, соответствующего заданному малому промежутку времени. Решая задачу о среднем времени достижения случайным процессом заданного уровня с помощью обратного уравнения Фоккера-Планка, было получено точное выражение для среднего времени пребывания выбранного магнитного момента вдоль равновесных направлений в зависимости от величины дипольного поля, создаваемого другими магнитными моментами. В случае, когда поле анизотропии велико и равновесные направления магнитного момента разделены высоким потенциальным барьером, было получено асимптотическое выражение для плотности вероятности переориентации магнитного момента.

Основываясь на знании плотностей вероятности переориентации для всех магнитных моментов, была разработана численная процедура выбора узлов решетки, в которых произойдет теоретически определённое число переворотов на протяжении заданного промежутка времени. Данная процедура моделирует взаимодействие системы с термостатом и адекватно учитывает его случайный характер. Совместное использование численной процедуры определения нового состояния ансамбля, соответствующего аналитически рассчитанному приращению намагниченности в рамках единого цикла позволяет получить закон релаксации намагниченности в виде дискретной последовательности значений для любого временного интервала.

РАЗДЕЛ 4

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В предыдущем разделе был описан алгоритм численного моделирования магнитной релаксации в двумерных ансамблях одноосных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией. Отметим, что настоящий метод является единственным, который позволяет в режиме реального времени при минимальных вычислительных затратах описывать динамику намагниченности таких систем на любых временах. Все представленные здесь результаты были получены с помощью обычных персональных компьютеров на базе процессоров Celeron и Pentium IV с тактовой частотой не более 1 ГГц. Текст программы, реализующей данный алгоритм, приведен в приложении Б.

Таким образом, наличие эффективного метода моделирования магнитной релаксации, позволило провести всестороннее исследование особенностей релаксации в зависимости от параметров системы. В настоящем разделе изучены влияние конечности решётки, плотности упаковки, характера упорядочения температуры и внешнего поля на закон магнитной релаксации. Проведён сравнительный анализ результатов численного моделирования и приближения среднего поля.

4.1. Исследование размерных эффектов

Объектом численного моделирования не может выступать бесконечная решётка наночастиц, поэтому на результат моделирования будут влиять не только корреляции направлений магнитных моментов, но и конечность ансамбля. Следует указать, что в силу дальнодействующего характера дипольного взаимодействия нельзя избавиться от размерных или краевых эффектов с помощью периодических граничных условий или условий Борна-Кармана [104, 105]. Исследование влияния размеров системы на закон релаксации важно ещё

и тем, что реальные ансамбли являются конечными и имеют ограниченное число структурных элементов.

Для сравнения результатов моделирования и среднего поля, а также для выяснения роли динамических корреляций необходимо минимизировать влияние конечности системы на процесс релаксации намагниченности. Простым и вместе с тем эффективным способом устранения действия краевых эффектов есть введение следующих граничных условий. Для квадратной решётки исходный участок транслируется восемь раз, как показано на рисунке 4.1. Каждая наночастица рассматривается как находящаяся в центре квадратной области такого же размера L (квадрат, изображённый пунктиром на рисунке). Взаимодействие ограничено только пределами этой области, т.е. считается, что магнитный момент выбранной наночастицы находится в дипольном поле, создаваемом магнитными моментами наночастиц, лежащими внутри или на границе пунктирного квадрата. Возникающие при этом ложные корреляции магнитных моментов, лежащих на противоположных сторонах исходной области, не оказывают существенного влияния на динамику намагниченности ансамбля. На начальном

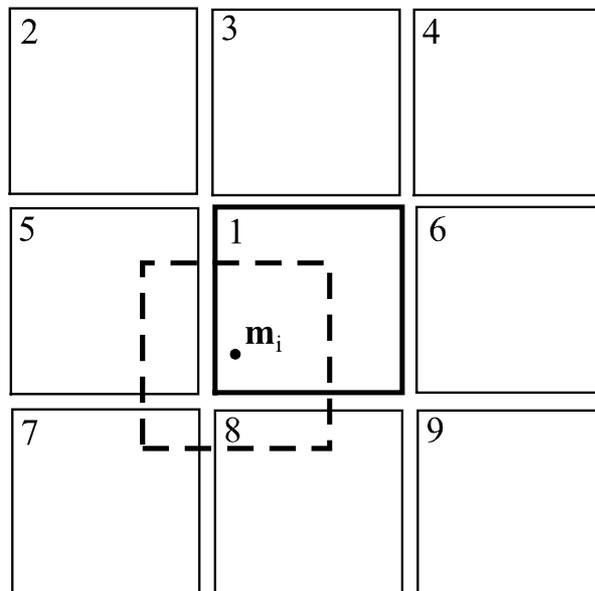


Рис. 4.1. – Граничные условия, с помощью которых моделируется бесконечная решётка.

этапе релаксации почти все магнитные моменты ориентированы вдоль первоначального направления и такие граничные условия практически не вносят искажений. На заключительном этапе дипольные поля в центре решётки и у её краёв отличаются не столь значительно, как вначале релаксации и роль граничных условий невелика.

При моделировании релаксации в гексагональной решётке наночастиц, используется шестиугольная область с характерным размером L , как показано на рисунке 4.2. Граничные условия, моделирующие бесконечную решётку, вводятся аналогично случаю квадратной решётки, а различия понятны из рисунка 4.3.

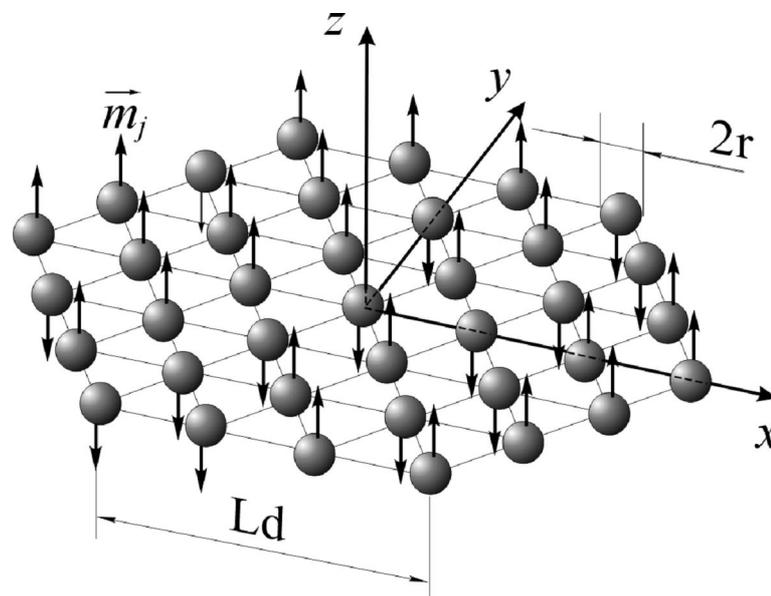


Рис. 4.2. – Схематическое изображение гексагональной решетки наночастиц.

Критерий выбора конкретной величины характерного размера решётки L , при котором размерные эффекты будут практически устранены, может быть только эмпирическим, и зависит от параметров исследуемой системы. В качестве иллюстрации влияния размеров ансамбля на закон релаксации и критерия выбора размера решётки, достаточного для моделирования релаксации в бесконечной решётке при вышеописанных граничных условиях, была проведена серия численных экспериментов для ансамбля Co наночастиц с параметрами [5] $r = 4 \cdot 10^{-9}$ м; $d = 3r = 12 \cdot 10^{-9}$ м; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $\lambda = 0.2$; $T = 300$ К. Результаты моделирования представлены на рисунке 4.4. Зависимость $\rho_{sim}(t)$ посчитана для $K = 100$. Зависимость $\rho_{lim}(t)$ посчитана так

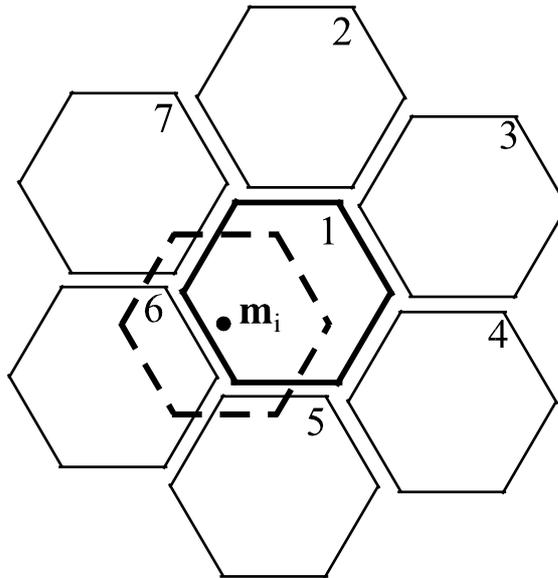


Рис. 4.3. – Граничные условия для гексагональной решётки.

же как и $\rho_{sim}(t)$, но размерные эффекты устранены путем введения граничных условий и увеличения размера решетки. Из рисунка видно, что приведенная намагниченность $\rho_{sim}(t)$ ($t > 0$) уменьшается с ростом размера решетки L , т.е. $\rho_{sim}(t)|_{L_1} > \rho_{sim}(t)|_{L_2}$ при $L_2 > L_1$ и $\rho_{sim}(t)$ стремится к предельному значению при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение намагниченности объясняется следующими причинами. Рост L приводит к увеличению (в среднем) локальных дипольных полей, действующих на магнитные моменты наночастиц. Результатом этого является увеличение средней плотности вероятности переориентации магнитного момента из положительного направления в отрицательное и уменьшение плотности вероятности обратной переориентации. Согласно (3.2), это приводит к увеличению разности между начальным и конечным значениями намагниченности, на интервале Δt_{n+1} , а значит к более быстрому спаду закона релаксации.

Также на рисунке 4.4 показана зависимость приведенной намагниченности от времени $\rho_{mf}(t)$, полученная в приближении среднего поля для бесконечной решетки путём численного интегрирования уравнения (2.50). Для выбранных значений параметров релаксация в приближении среднего поля характеризуется следующими значениями: $a \approx 29.01$, $\zeta \approx 0.31$, $t_r \approx 8.85 \cdot 10^{-11}$ с, $\tau_0 \approx 1.33 \cdot 10^{-5}$ с, $\tau_\infty \approx 1.56$ с и $\tau_n \approx 28.89$ с.

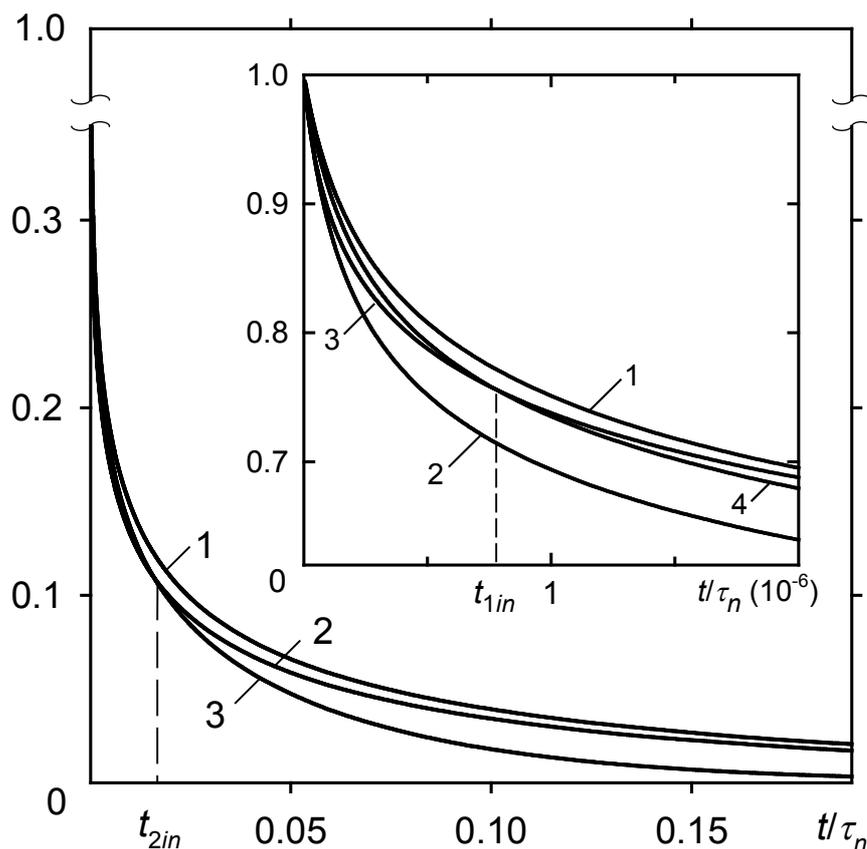


Рис. 4.4. – Графики величин $\rho_{sim}(t)$ при $L = 50$ (кривая 1), $\rho_{lim}(t)$ (кривая 2) и $\rho_{mf}(t)$ (кривая 3). Вставка: Те же зависимости и $\rho_{sim}(t)$ при $L = 70$ (кривая 4) на малых временах.

Поскольку в момент времени $t = 0$ локальное дипольное поле бесконечной решетки всегда больше, чем максимальное значение такого поля для конечной решетки, условие $\rho_{sim}(t) > \rho_{mf}(t)$ ($t > 0$) должно сохраняться на малых временах. Это условие также будет сохраняться также на достаточно больших временах, когда корреляции магнитных моментов приводят к замедлению процесса релаксации намагниченности на конечной стадии по сравнению с приближением среднего поля. Однако соотношение между $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ на промежуточных временах при фиксированной температуре зависит от размера решетки L .

Чтобы объяснить эту зависимость, отметим что, на начальной стадии только некоторые магнитные моменты претерпевают переориентацию. При этом реальные изменения дипольного поля происходит только для наночастиц, лежащих в

некоторой окрестности инвертированных магнитных моментов, в то время как для подавляющего большинства наночастиц изменение поля будет пренебрежимо малым. В приближении же среднего поля, любое изменение намагниченности приводит к пропорциональному изменению величины поля (2.30), действующего на все частицы. Это значит, что для большинства $j \in A_+(t)$ выполняется условие $w_+(t; j) > w_+(t)$, а для $j \in A_-(t)$ – условие $w_-(t; j) < w_-(t)$. Прямым следствием последних условий является то, что, начиная с некоторого времени, спад намагниченности при моделировании происходит более быстро, чем в приближении среднего поля. Однако, как было показано выше, конечность решетки обуславливает уменьшение локальных дипольных полей, действующих на наночастицы, а значит и уменьшение скорости релаксации на начальном её этапе. В то же время на заключительном этапе уменьшение скорости релаксации обусловлено корреляциями направлений магнитных моментов. Конкуренция этих эффектов приводит к тому, что существует некоторое значение размера решетки $L_{cr} = L_{cr}(T)$, для которого выполняются следующие условия

1. $\rho_{sim}(t) > \rho_{mf}(t)$ для всех t при $L < L_{cr}$ (кривая 1 рисунка 4.4) и для $t > t_{2in}$ при $L > L_{cr}$ (кривая 2 рисунка 4.4);
2. $\rho_{sim}(t) = \rho_{mf}(t)$ для $t = t_{tg}$ при $L = L_{cr}$, где t_{tg} – точка касания;
3. $\rho_{sim}(t) < \rho_{mf}(t)$ для $t_{1in} < t < t_{2in}$ при $L > L_{cr}$ (кривая 4 рисунка 4.4);

Здесь $t_{1in} \approx 2.25 \cdot 10^{-5}$ с, $t_{2in} \approx 2.09 \cdot 10^{-2}$ с. С ростом размера решетки L время t_{1in} убывает, а время t_{2in} – возрастает. В результате, при $L \rightarrow \infty$ имеем $\rho_{sim}(t) \rightarrow \rho_{lim}(t)$, первая точка пересечения исчезает, т. е. $t_{1in} \rightarrow 0$, а вторая точка пересечения стремиться к предельному значению $t_{2in} \rightarrow t_{in}$ (кривая 2 рисунка 4.4, $t_{in} \approx 0.46$ с).

Чтобы более полно охарактеризовать различие между $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$, и определить значение L , достаточное для моделирования бесконечной решётки, введем параметр $\chi_L(t) = [\rho_{sim}(t) - \rho_{mf}(t)]/\rho_{sim}(t)$. Зависимости $\chi_L(t)$ для тех же параметров ансамбля кобальтовых наночастиц приведены на рисунке 4.5. Ненулевое значение этого параметра обусловлено конечностью ансамбля и корреляциями магнитных моментов наночастиц. Роль корреляций возрастает со временем и на больших временах является причиной существенного различия

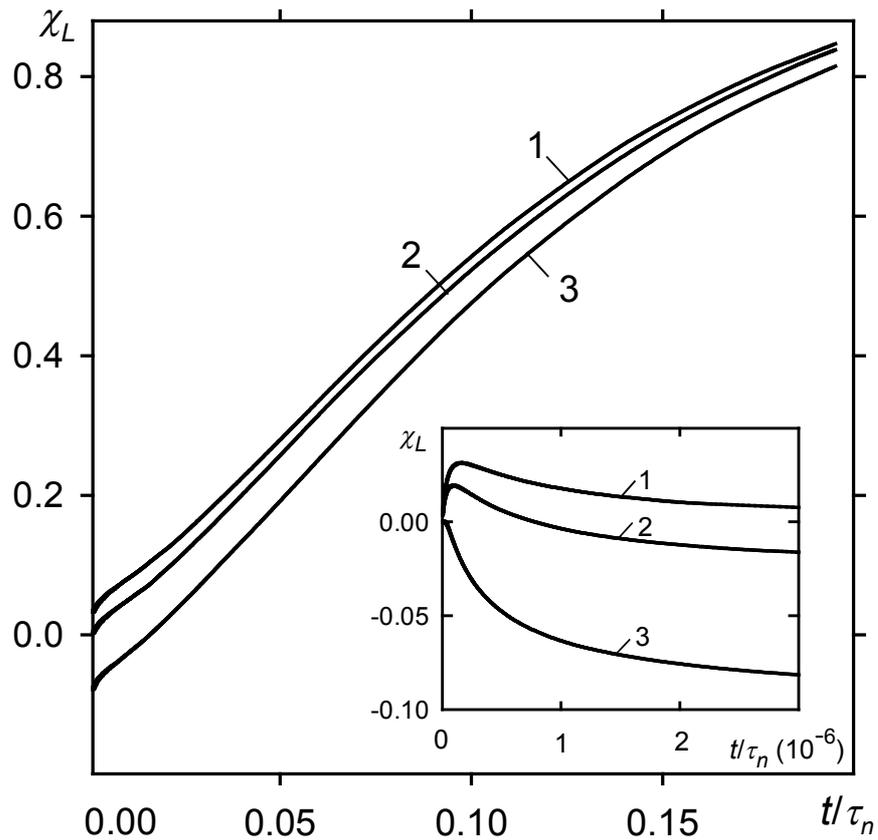


Рис. 4.5. – Зависимости $\chi_L(t)$ для различных размеров решетки: $L = 50$ (кривая 1), $L = 70$ (кривая 2) и $L = \infty$ (кривая 3). Вставка: те же зависимости на малых временах.

между зависимостями $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$: $\chi_L(t) \rightarrow 1$ при $t \rightarrow \infty$. Соответственно роль граничных эффектов максимальна на начальном этапе релаксации. Как было сказано ранее, спад намагниченности должен происходить быстрее, чем предсказывает приближение среднего поля. Это значит, что величина $\chi_L(t)$ на малых временах должна быть отрицательной. На вставке рисунка 4.5 показано, что этому условию удовлетворяет кривая 3, полученная при $L = 100$ с применением указанных граничных условий. Это значит, что такой размер решётки достаточно для устранения краевых эффектов.

Тот факт, что плотность вероятности переориентации $w_{\pm}(t; j)$ в уравнении (3.26) экспоненциально зависит от большого параметра a , имеет два следствия. Первое является очевидным и заключается в сильной зависимости закона релаксации $\rho_{sim}(t)$ от температуры благодаря тому, что величина a обратно пропорцио-

нальна T . Второе имеет более сложную природу, и относится к разному характеру временных зависимостей $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ для различных температур. Согласно вышеизложенным результатам, при определенном значении T и размере решетки, удовлетворяющему условию $L < L_{cr}$, справедливо неравенство $\rho_{sim}(t) > \rho_{mf}(t)$ для всех $t > 0$. С уменьшением T плотности вероятности $w_{\pm}(t, j)$ уменьшаются неодинаково, и чем меньше температура, тем больше относительная разница между ними. Это значит, что в случае меньших температур, переориентации магнитных моментов гораздо чаще, по сравнению со случаем больших температурах, будут иметь место в узлах, которым отвечают наибольшие значения $w_{\pm}(t, j)$. Как следствие – на малых временах разность $\rho_{sim}(t) - \rho_{mf}(t)$ будет расти с уменьшением T . Поэтому если при заданной температуре выполняется условие $L < L_{cr}$, но разница между L и L_{cr} не слишком велика, то кривые $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ могут иметь точки пересечения при меньшем значении температуры. Это утверждение подтверждается численным моделированием. Так, на рисунке 4.4 в случае $L = 50$ пересечение между $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ (кривые 1 и 2) отсутствует, в то время как на рисунке 4.6, отражающем закон релаксации для тех же параметров, но при $T = 150$ К, имеются точки пересечения, первая из которых обозначена на вставке. Для последнего случая имеют место следующие значения остальных параметров $a \approx 58.02$, $\tau_0 \approx 10.72$ с, $\tau_{\infty} \approx 2.54 \cdot 10^{12}$ с и $\tau_{\infty} \approx 8.11 \cdot 10^{13}$ с, $t_{1in} \approx 56.12$ с, $t_{2in} \approx 6.83 \cdot 10^{11}$ с.

Закон релаксации намагниченности для рассматриваемой системы не может быть вычислен, используя т.н. метод Монте-Карло с временным квантованием шага, который разработан в работах [106, 107, 110]. Согласно этому методу каждому шагу Монте-Карло соответствует некоторый временной интервал Δt , который определяется формулой (1.8) ($R_0 < 1$) – максимальная величина одного шага. Тогда число шагов Монте-Карло $M = \mu\tau_n/\Delta t$, которое необходимо выполнить, чтобы получить зависимость намагниченности от времени на интервале $(0, \mu\tau_n)$, согласно (1.8) будет

$$M = \frac{5\mu}{R^2(1+\lambda^2)} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} e^a. \quad (4.1)$$

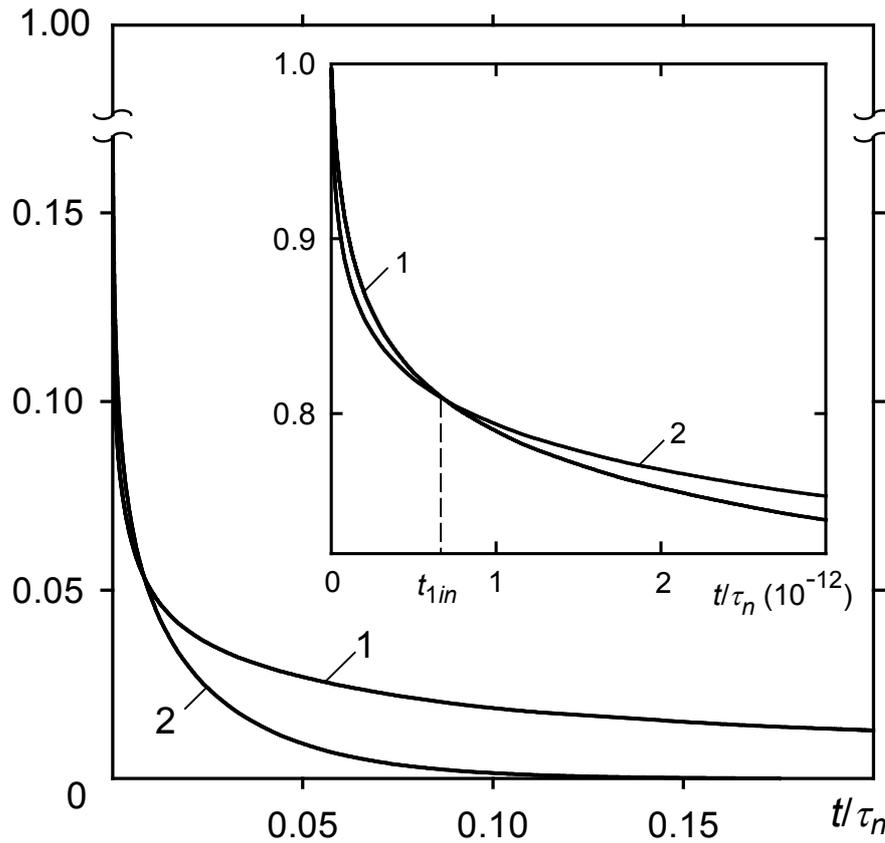


Рис. 4.6. – Графики величин $\rho_{sim}(t)$ при $L = 50$ (кривая 1), $\rho_{mf}(t)$ (кривая 2).

Вставка: те же зависимости на малых временах.

Для значений параметров, которые использовались выше, значение M при $R_0 = 1$ $\mu = 0.2$ будет составлять $M \approx 4.33 \cdot 10^{10}$ для $T = 300 K$ и $M \approx 6.08 \cdot 10^{22}$ для $T = 150 K$. Это не только требует огромных вычислительных затрат, но и ставит под сомнение результат, который может быть получен таким способом. Методы Монте-Карло считаются дающими правильный результат при некотором соотношении принятых и не принятых изменений в системе ($\sim 0.5-0.2$) [105]. Если даже при очень больших значениях максимального отклонения $R_0 \rightarrow 1$ число шагов за время $\mu\tau_n$ очень велико, то это значит, что почти все пробные шаги не принимаются, или что за это время каждый магнитный момент совершает большое число переворотов, тогда как при $\mu = 0.2$ за это время намагниченность может еще не достигнуть равновесного значения.

4.2. Влияние типа упаковки на магнитную релаксацию

Учет корреляций магнитных моментов позволяет увидеть влияние структуры ансамбля на процесс магнитной релаксации. Так, для гексагональной решетки, в узлах которой размещены наночастицы (см. рис. 4.2), значение среднего поля будет определяться формулой (2.30), где выражение для S_1 (2.29) переписывается для гексагональной решетки как

$$S_1 = \frac{1}{8} \sum_{n_1, n_2} \frac{1}{((2n_1 + n_2)^2 + 3n_2^2)^{3/2}} \approx 1.1393. \quad (4.2)$$

На рисунке 4.7 представлены результаты моделирования для квадратной и гексагональной решёток с характерными размерами $L = 100$ и $L = 60$ соответственно. Все остальные параметры решёток одинаковы и соответствуют использованным в предыдущем подразделе. Размерные эффекты устранены путём наложения граничных условий, а значит, на закон релаксации влияет только тип упаковки частиц в решётке. Будем обозначать индексом “^s” результаты, относящиеся к квадратной решётке, а индексом “^h” – к гексагональной. В приближении среднего поля тип упаковки влияет только на интенсивность дипольного взаимодействия ζ (см.(2.52)) посредством решёточной суммы S_1 , большему значению которой соответствует большее среднее поле, и, следовательно, более быстрая релаксация. Так как $S_1^h > S_1^s$ (см. (2.29) и (4.2)), то неравенство $\rho_{mf}^h(t) < \rho_{mf}^s(t)$ имеет место на всём временном интервале.

Моделирование показало, что на начальном этапе релаксации намагниченности в гексагональной решётке действительно протекает быстрее: $\rho_{sim}^h(t) < \rho_{sim}^s(t)$. Однако на больших временах это неравенство не выполняется. Каждая частица в гексагональной решётке имеет 6 ближайших соседей, в то время как в квадратной – только 4. Когда почти все магнитные моменты ориентированы вдоль первоначального направления, это обстоятельство обуславливает бóльшие дипольные поля в гексагональной решетке по сравнению с квадратной и кривая намагниченности $\rho_{sim}^h(t)$ спадает более круто, поскольку

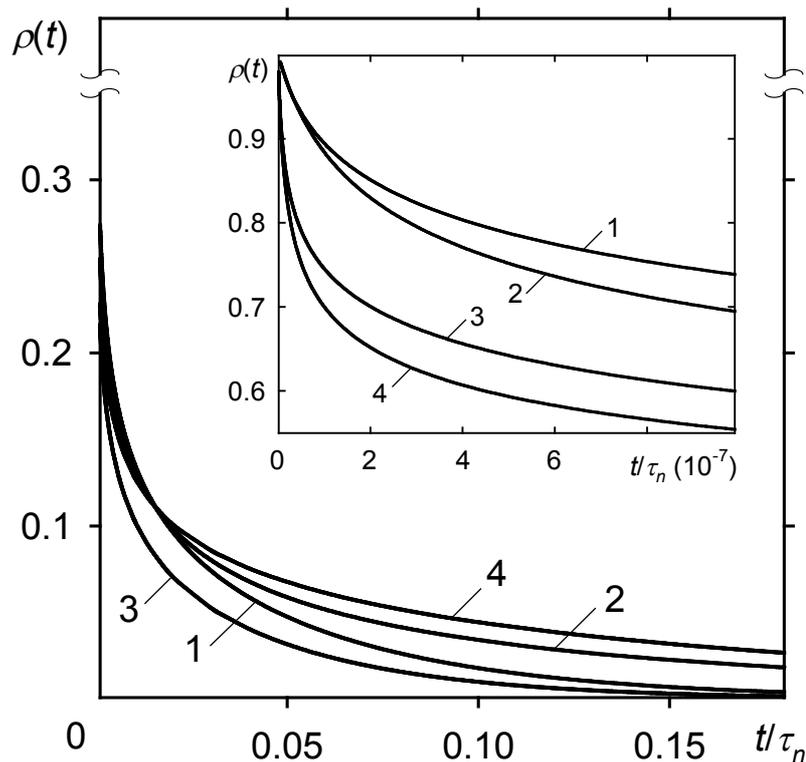


Рисунок 4.7 – Закон магнитной релаксации для различных типов решётки.

$$1 - \rho^s_{sim}(t); 2 - \rho^s_{mf}(t) 3 - \rho^h_{sim}(t); 4 - \rho^h_{mf}(t)$$

большим локальным дипольным полям отвечает большая вероятность переориентации.

При приближении системы к состоянию равновесия, дипольное взаимодействие стремится упорядочить магнитные моменты антиферромагнитным образом. Для квадратной решётки такое упорядочение характеризуется тем, что ближайшее окружение каждой наночастицы имеет противоположное направление магнитных моментов. В то же время для гексагональной решётки это выполняется только для 4 из 6 ближайших соседей, что обуславливает меньшие, по сравнению с квадратной решёткой, локальные дипольные поля в системе. Таким образом, на заключительном этапе интенсивность взаимодействия для гексагональной решётки оказывается более слабой, чем для квадратной решётки, поэтому кривая $\rho^h_{sim}(t)$ стремится к нулю медленнее, чем $\rho^s_{sim}(t)$.

В случае, когда плотности упаковки ансамблей равны, приближение среднего поля предсказывает лишь незначительное отличие полей, действующее

щих на магнитные моменты частиц квадратной и гексагональной решеток. Равенство плотностей упаковки определяется равенством площадей элементарных ячеек. Это выполняется при отношении постоянных решетки $d^s/d^h = 3^{1/4}2^{-1/2}$. Тогда величина среднего поля для гексагональной решетки будет составлять $3^{-3/4}2^{3/2}S_1^h/S_1^s \approx 0.9845$ от поля для квадратной решетки. Такое незначительное изменение величины $b(t)$ в (2.51) не приводит к существенному изменению закона релаксации (2.50), что подтверждается слиянием кривых 3 и 4, рисунок 4.8, на основном графике. На вставке видно, что $\rho_{mf}^h(t) > \rho_{mf}^s(t)$. Это неравенство выполняется для всех времён, поскольку среднее поле для квадратной решётки больше, чем для гексагональной.

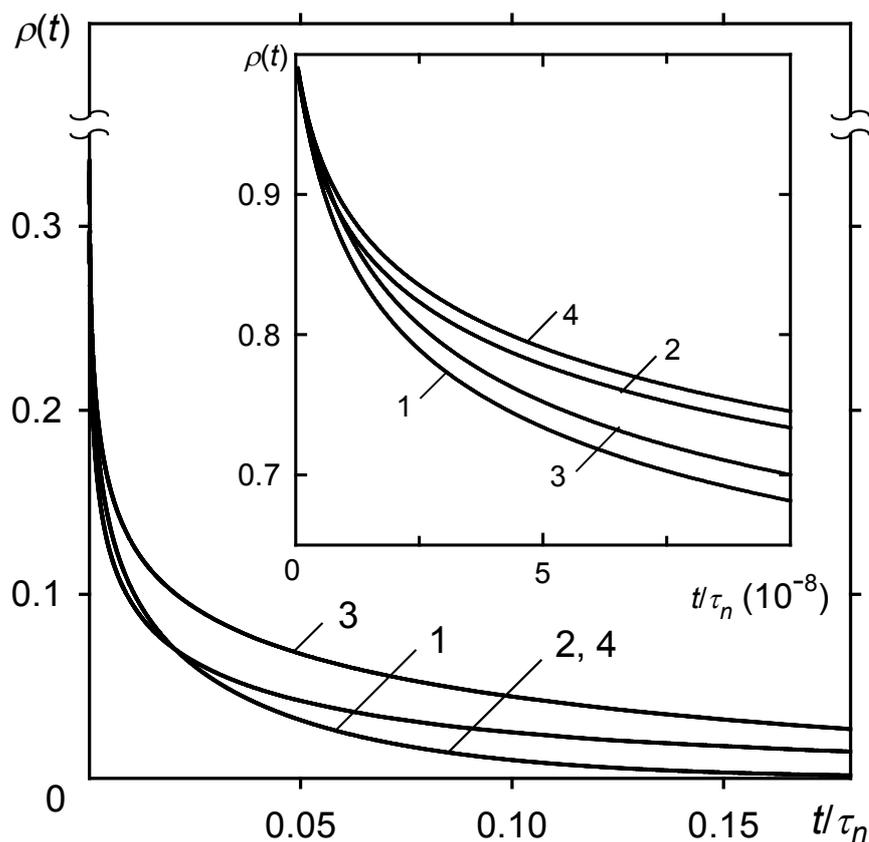


Рис. 4.8. —Законы релаксации для различных решеток с равной плотностью упаковки. 1 — $\rho_{sim}^s(t)$; 2 — $\rho_{mf}^s(t)$; 3 — $\rho_{sim}^h(t)$; 4 — $\rho_{mf}^h(t)$.

В то же время, численное моделирование обнаруживает существенное различие законов магнитной релаксации для этих ансамблей при условии равенства их поверхностных плотностей. Намагниченность гексагональной решетки (кривая 1, рис. 4.8) существенно превышает намагниченность квадратной решетки (кривая 2, рис. 4.8). Т.е. условие $\rho_{sim}^h(t) > \rho_{sim}^s(t)$ выполняется на всех временах. Это говорит о том, что, несмотря на большее число ближайших соседей, меньшее расстояние между наночастицами ($d^s \approx 2.7918 \cdot 10^{-9}$ м, $d^h = 3 \cdot 10^{-9}$ м) обуславливает большие локальные поля в квадратной решётке, и, следовательно, большую интенсивность взаимодействия. Поэтому описанный ранее эффект для двух решёток с одинаковым периодом, когда на малых временах $\rho_{sim}^h(t) < \rho_{sim}^s(t)$, в данном случае не будет иметь места. На больших временах кривые намагниченности $\rho_{sim}^h(t)$ и $\rho_{sim}^s(t)$ на рисунках 4.7 и 4.8 ведут себя одинаково.

Таким образом, корреляционные эффекты в зависимости от структуры обуславливают различное поведение релаксации.

4.3. Релаксация в поле смещения

В рамках приближения среднего поля было показано, что поле смещения обуславливает ненулевой уровень равновесной намагниченности ансамбля наночастиц. Сравнительный анализ результатов численного моделирования и среднеполевой теории показал, что на заключительном этапе релаксации, когда действие среднего поля практически отсутствует, возникающие корреляции направлений магнитных моментов оказывают существенное влияние на динамику намагниченности. Следовательно, намагниченность основного состояния ансамбля будет отличаться от величины, предсказываемой приближением среднего поля, причём в силу антиферромагнитного характера дипольного взаимодействия, её действительное значение по модулю будет меньше, чем среднеполевое.

Для нахождения зависимости равновесного уровня намагниченности от величины внешнего поля смещения $\rho_1^{sim}(H_0)$ был использован алгоритм Мет-

рополиса [104, 105], который относится к стандартным методам Монте-Карло. Для ансамбля S_0 наночастиц с параметрами $r = 4 \cdot 10^{-9}$ м; $d = 3r = 12 \cdot 10^{-9}$ м; $H_a = 6400$ Э ($5.094 \cdot 10^5$ А/м); $m/V = 1400$ Гс ($1.4 \cdot 10^5$ А/м); $\lambda = 0.2$; $T = 300$ К, результаты моделирования представлены на рисунке 4.9. В отличие от аналогичных зависимостей для менее плотного ансамбля (см. рис. 2.12), величина ρ_1 обнаруживает более слабую зависимость от величины поля смещения, о чём свидетельствует относительное расположение кривых 2 и 3 на рисунке 4.9.

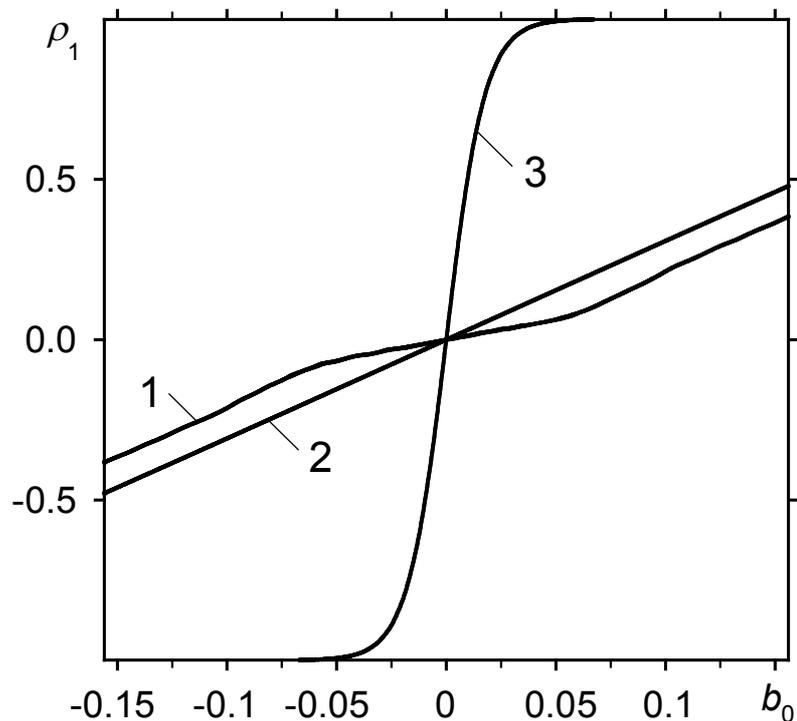


Рис. 4.9. Намагниченность основного состояния, полученная 1 – методом Монте-Карло; 2 – в приближении среднего поля; 3 – в приближении невзаимодействующих частиц.

Согласно среднеполевой теории, намагниченность ансамбля достигает равновесного значения, когда сумма среднего дипольного и внешнего полей равна нулю. Однако при достижении этого условия, магнитные моменты будут находиться в локальных, различных как по модулю, так и по направлению дипольных полях. Локальные поля распределены таким образом, что система

стремиться упорядочиться антиферромагнитным образом, следовательно, абсолютное значение намагниченности стремится к меньшему значению. Поэтому кривая 1 на рисунке 4.9 расположена ближе к нулю, чем кривая 2.

В отсутствие внешнего поля кривые $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ для бесконечной решётки пересекаются только один раз (см рис. 4.4). В то же время, при определённых значениях H_0 , зависимости намагниченности от времени, полученные в приближении среднего поля и в результате моделирования, могут иметь две точки пересечения, либо не иметь их совсем. Графики, представленные на рисунке 4.10, иллюстрируют первую ситуацию: зависимости $\rho_{sim}(t)$ и $\rho_{mf}(t)$ пересекаются в точках $t_{1in} \approx 1.11$ с и $t_{2in} \approx 6.04$ с. В случае $H_0 = 0$ неравенство $\rho_{sim}(t) > \rho_{mf}(t)$ при $t \rightarrow \infty$ обусловлено спадом темпа релаксации в результате корреляций направлений магнитных моментов. Если $H_0 > 0$, то условие $\rho_{sim}(t) > \rho_{mf}(t)$ реализуется только на промежуточном интервале $(t_{1in}; t_{2in})$ в силу того, что $\rho_1^{sim} < \rho_1^{mf}$. Таким образом, наблюдается конкуренция между эффектом замед-

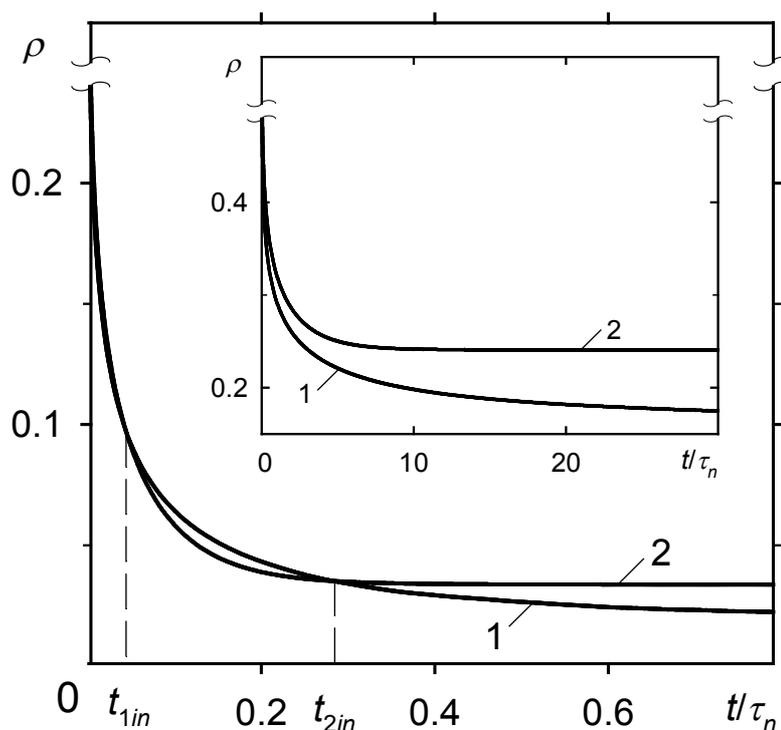


Рис. 4.10. – Закон магнитной релаксации при наличии поля смещения

$H_0 = 70 \text{ Э}$ ($5.57 \cdot 10^3 \text{ А/м}$), на вставке – $H_0 = 500 \text{ Э}$ ($3.98 \cdot 10^4 \text{ А/м}$);

1 – $\rho_{sim}(t)$, 2 – $\rho_{mf}(t)$.

ления релаксации со временем и несовпадением величины ρ_1 для моделирования и среднего поля. При малых значениях H_0 это приводит к появлению второй точки пересечения. С ростом величины внешнего поля точка t_{2in} движется в сторону t_{1in} и начиная с некоторого значения H_0 условие $\rho_{sim}(t) < \rho_{mf}(t)$ выполняется для всех t (см вставку к рис. 4.10).

Тип упаковки наночастиц в ансамбле служит причиной различной интенсивности дипольного взаимодействия. Как было отмечено выше, на заключительном этапе релаксации корреляционные эффекты в квадратной решётке наночастиц более ярко выражены, чем в гексагональной. Следовательно, гексагональная решётка более подвержена действию внешнего поля, и её равновесная намагниченность будет по модулю большей, чем для квадратной решётки для одного и того же поля смещения H_0 (см. рис. 4.11, 4.12). В то же время, приближение среднего поля предсказывает обратное соотношение этих величин (см. вставки к рис. 4.11, 4.12).

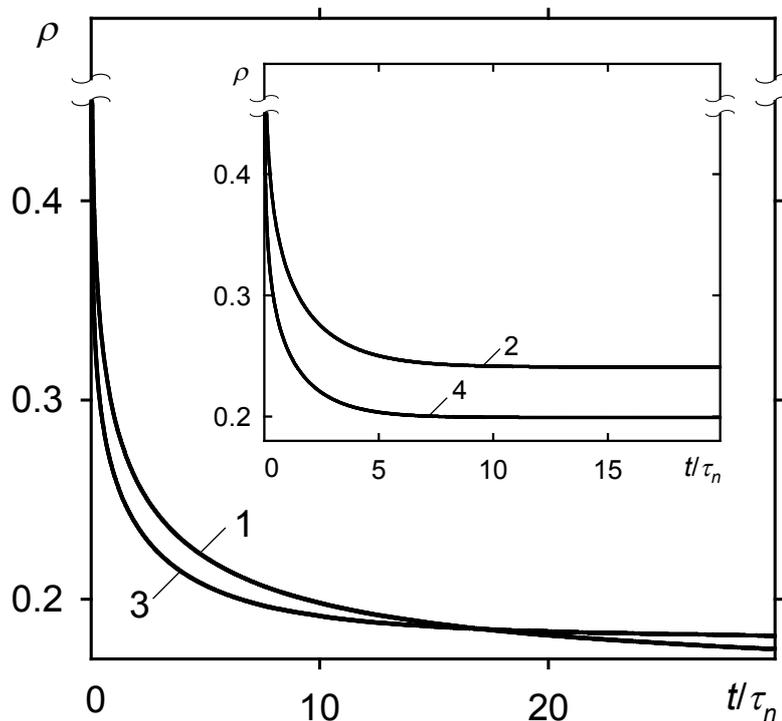


Рис. 4.11. – Закон магнитной релаксации при $H_0 = 500 \text{ Э}$ ($3.98 \cdot 10^4 \text{ А/м}$) для различных типов решётки; 1 – $\rho^s_{sim}(t)$; 2 – $\rho^s_{mf}(t)$; 3 – $\rho^h_{sim}(t)$; 4 – $\rho^h_{mf}(t)$.

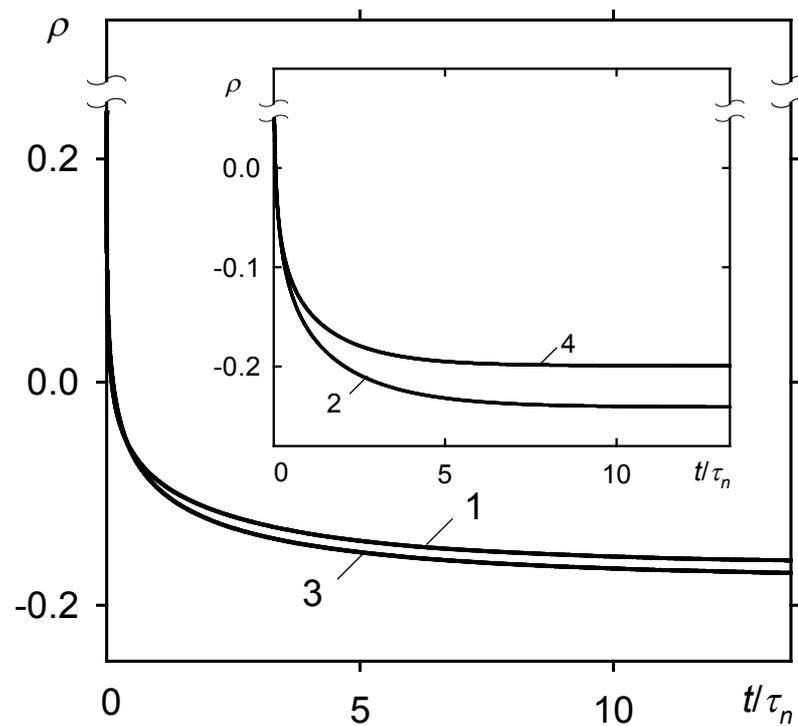


Рис. 4.12. – Закон магнитной релаксации при $H_0 = -500 \text{ Э}$ ($-3.98 \cdot 10^4 \text{ А/м}$) для различных типов решётки; 1 – $\rho^s_{sim}(t)$; 2 – $\rho^s_{mf}(t)$; 3 – $\rho^h_{sim}(t)$; 4 – $\rho^h_{mf}(t)$.

4.4. Об аппроксимации закона релаксации различными зависимостями

Отсутствие точного аналитического решения и эффективного алгоритма моделирования магнитной релаксации в исследуемых системах послужило причиной того, что зависимость намагниченности от времени аппроксимировалась на конечных временных интервалах различными зависимостями. Другими словами, активно использовался аппарат регрессии, а численные коэффициенты выводились на основании экспериментальных данных, полученных для некоторого, как правило, небольшого промежутка времени. Однако, как было указано в работе [135], такой подход не позволяет описать релаксацию намагниченности для любого времени с помощью одной зависимости. Кроме того, все существующие на данное время эксперименты проводились на неупорядоченных системах, следовательно, на закон релаксации оказывали воздействие

нерегулярность расположения наночастиц, распределение их размеров и произвольность ориентации магнитного момента.

Как в рамках приближении среднего поля, так и при моделировании учитывалось только дипольное взаимодействие, значит, на основании анализа полученных результатов можно сделать вывод о том может ли это взаимодействие обусловить ту или иную зависимость намагниченности от времени. На приведённых ниже рисунках масштабы выбраны таким образом, что линейный характер зависимостей будет свидетельствовать о пропорциональности закона релаксации той или иной функции. Исходные данные были получены для гексагональной решётки с параметрами, значения которых было указано выше.

Линейные участки графиков рисунка 4.13 указывают на то, что на этих временных интервалах релаксация носит логарифмический характер, что характерно, например, для ансамблей наночастиц с логнормальным распределением их радиусов [118, 119]. Аппроксимация зависимости $\rho(t)$ такой зависимостью часто встречается в работах по данной тематике (см. например [136-138]). Однако линейный участок наблюдается лишь на промежуточных временах для закона релаксации, полученного в приближении среднего поля. Это подтверждает тот факт, что дипольное взаимодействие не является причиной логарифмической релаксации [139].

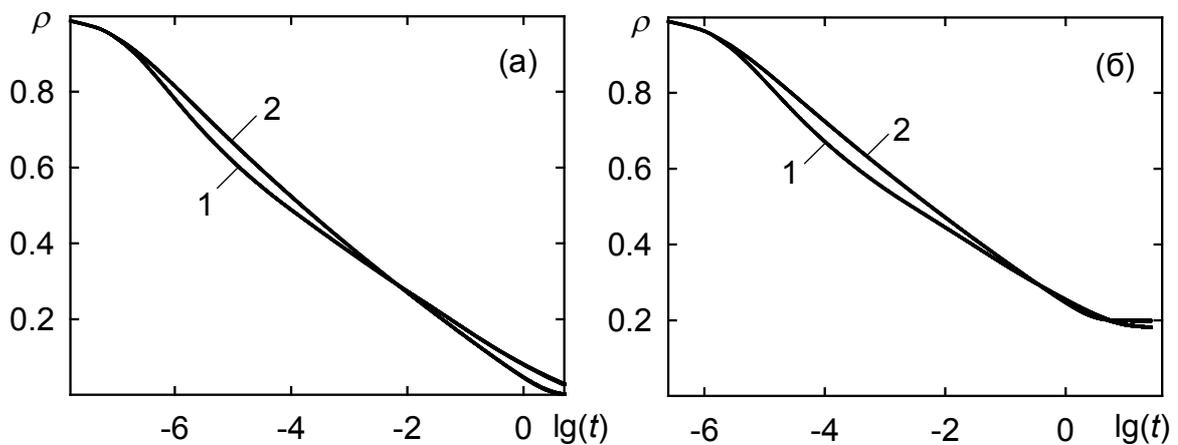


Рис. 4.13. – К аппроксимации закона магнитной релаксации логарифмической зависимостью ($\rho \sim \lg(t)$); (а) – $H_0 = 0$, (б) – $H_0 = 500 \text{ Э}$ ($3.98 \cdot 10^4 \text{ А/м}$);

$$1 - \rho_{sim}(t), 2 - \rho_{mf}(t).$$

Степенной закон релаксации, как правило, следовал из анализа данных, полученных стандартными методами Монте-Карло [84, 140]. Необоснованность такого подхода обусловлена отсутствием привязки к реальному времени алгоритмов Монте-Карло. Из рисунка 4.14 видно, что степенная зависимость не имеет места в описании динамики намагниченности ансамблей частиц, взаимодействующих дипольным образом.

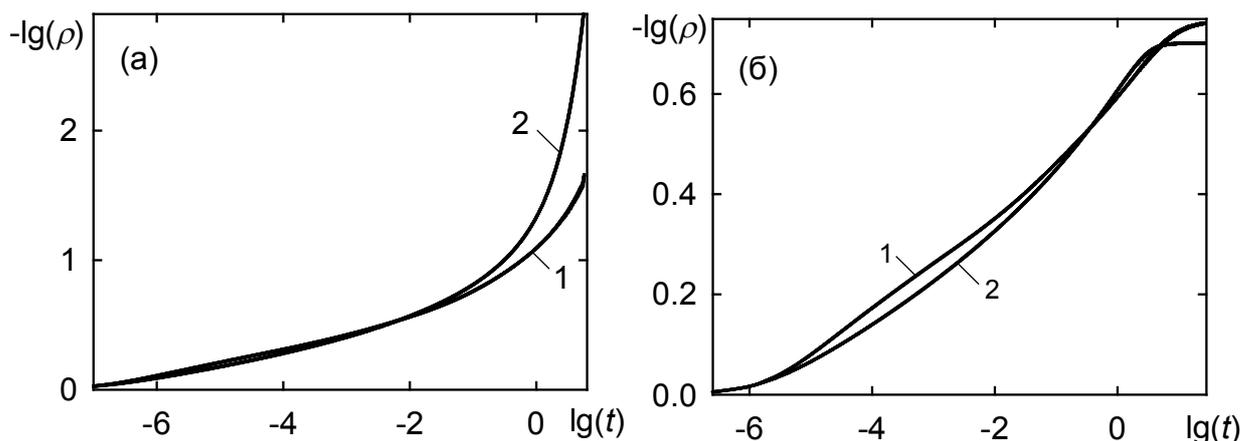


Рис. 4.14 – К аппроксимации закона магнитной релаксации степенной зависимостью ($\rho \sim t^{-\alpha}$); (а) – $H_0 = 0$, (б) – $H_0 = 500$ Э ($3.98 \cdot 10^4$ А/м); 1 – $\rho_{sim}(t)$, 2 – $\rho_{mf}(t)$.

Аппроксимация закона релаксации т.н. замедленной экспоненциальной (stretched exponential) зависимостью предлагалась в работах [94, 138, 141]. В частности, Лоттисом (Lottis) и др. [94], такой подход был предложен для объяснения численных результатов, полученных в рамках приближения среднего поля. В настоящей диссертации это приближение было использовано более корректно, с учётом реальной структуры ансамбля. Однако полученные результаты (см. рис. 4.15) показывают, что даже в приближении среднего поля динамика намагниченности не подчиняется такому закону.

В качестве характеристики релаксации в магнитных системах часто используют т.н. коэффициент магнитной вязкости [142-144]. Эта величина определяется как $S(t) = -d\rho/d\ln(t)$. Если на достаточно широком временном интервале выполняется условие $S(t) \approx const$, тогда релаксация происходит по логарифми-

ческому закону. Однако для рассмотренных здесь систем логарифмическая релаксация не имеет места и функция $S(t)$ обнаруживает сильную зависимость от t (см. рис. 4.16). Это свидетельствует о том, что процесс термоиндуцированной релаксации намагниченности для таких систем подчиняется более сложной зависимости.

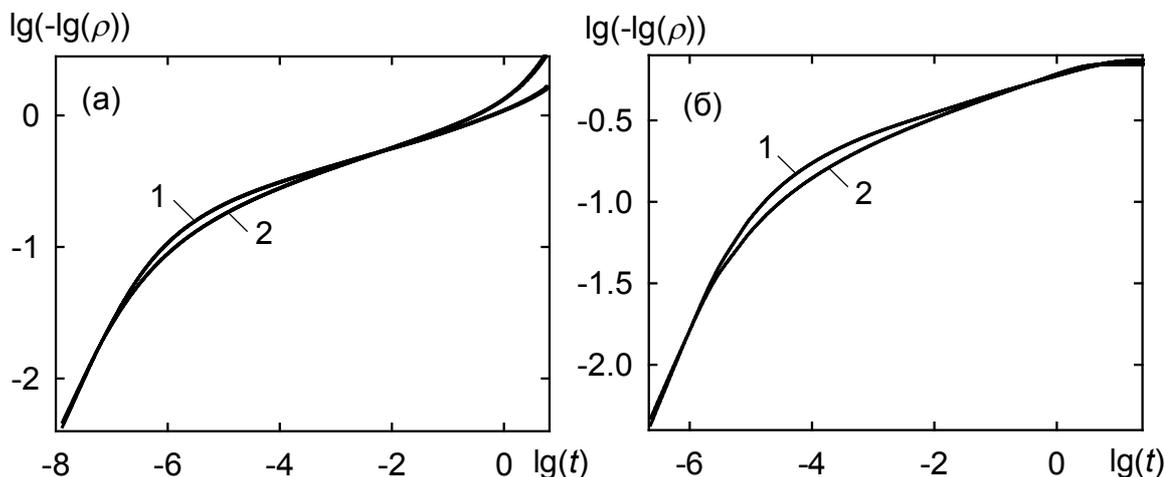


Рис. 4.15. – К аппроксимации закона магнитной релаксации замедленной экспоненциальной (stretched exponential) зависимостью ($\rho \sim \exp[at^\alpha]$); (а) – $H_0 = 0$, (б) – $H_0 = 500$ Э ($3.98 \cdot 10^4$ А/м); 1 – $\rho_{sim}(t)$, 2 – $\rho_{mf}(t)$.

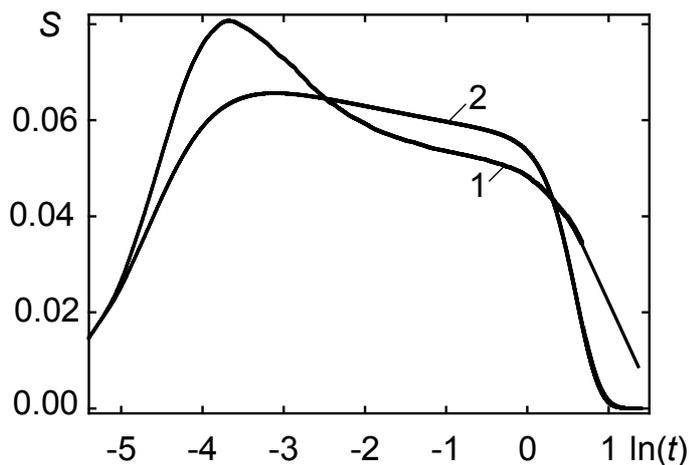


Рис. 4.16 – Коэффициент магнитной вязкости.

Выводы к разделу 4

В настоящем разделе показано, что реальное поведение магнитной релаксации конечного ансамбля наночастиц может существенно отличаться от поведения, предсказываемого приближением среднего поля для бесконечного ансамбля. Это отличие обусловлено как конечностью ансамбля, так и корреляциями направлений магнитных моментов, которые возникают вследствие дипольного взаимодействия между частицами. Для конечной решетки релаксация намагниченности на малых и больших временах протекает более медленно, чем в приближении среднего поля для бесконечной решетки, а на промежуточных этапах положение кривых намагниченности относительно друг друга зависит от размера ансамбля и от температуры. Увеличение размеров решетки обуславливает ускорение темпов релаксации, и в предельном случае бесконечной решетки релаксация до некоторого времени t_{in} протекает быстрее, чем в приближении среднего поля, а затем – более медленно. Эта особенность обусловлена корреляционными эффектами, роль которых растет со временем.

Исследовано влияние типа упаковки наночастиц на процесс релаксации. Установлено, что зависимости намагниченности от времени для квадратной и гексагональной решётки одинакового периода различаются следующим образом. В отличие от приближения среднего поля, которое предсказывает более быстрый спад намагниченности для гексагональной решётки на всех временах, из результатов моделирования следует, что на начальном этапе релаксация протекает быстрее в гексагональной решётке частиц, в то время как на заключительном – в квадратной. Это связано с различной степенью влияния корреляционных эффектов на динамику намагниченности в зависимости от типа упорядочения частиц в ансамбле. Показано, что при одинаковой плотности упаковки системы, когда кривые намагниченности, полученные для этих двух решёток в приближении среднего поля, совпадают, реальная временная зависимость намагниченности для гексагональной решётки лежит всегда выше, чем для квадратной.

Влияние внешнего поля на процесс релаксации в первую очередь связано с ненулевым значением намагниченности основного состояния системы в этом случае. С помощью моделирования установлено, что величина равновесной намагниченности не совпадает с величиной, полученной в приближении среднего поля. Показано, что в зависимости от величины поля смещения и типа решётки кривые намагниченности, полученные в приближении среднего поля и с помощью моделирования, могут пересекаться в двух точках или не пересекаться совсем. Это подтверждает важность роли динамических корреляций направлений магнитных моментов в релаксации намагниченности ансамблей наночастиц, находящихся в поле смещения.

Используя различные масштабы представления графиков исследуемых зависимостей, показано, что для данных ансамблей процесс релаксации не может быть описан такими элементарными функциями как логарифмическая, степенная, замедленная экспоненциальная (*stretched exponential*).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным результатом проведенного исследования является установление общих закономерностей, присущих процессу магнитной релаксации в двумерных ансамблях одноосных ферромагнитных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией, и раскрытие их физической сущности. Решение этой фундаментальной проблемы получено путем построения среднеполевой теории магнитной релаксации и методом численного моделирования, основанного на принципиально новом подходе, который учитывает влияние как термостата, так и дипольных корреляций направлений магнитных моментов наночастиц.

Наиболее значимые результаты диссертации состоят в следующем.

1. Построена среднеполевая теория термоиндуцированной релаксации намагниченности 2D систем одноосных ферромагнитных наночастиц с большой перпендикулярной анизотропией. В её основу положено уравнение Фоккера-Планка для функции распределения отдельного магнитного момента, в котором влияние остальных магнитных моментов учтено посредством усреднённого локального дипольного поля, действующего в месте расположения выделенного. Решение уравнения Фоккера-Планка, найденное в неявном виде методом Крамерса, использовано для вывода обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, определяющего закон магнитной релаксации в данных системах. Применение строгой процедуры вывода этого уравнения и более реалистичный учет дипольных полей – основные особенности развитой теории, отличающие ее от предложенных ранее.

2. В рамках развитой теории проведено всестороннее исследование влияния температуры, магнитного поля смещения, характеристик наночастиц и пространственного их распределения, а также усредненного значения локального дипольного поля на процесс магнитной релаксации. Установлено, в частности, что как в отсутствии поля смещения, так и при его наличии процесс релаксации характеризуется не одним, как в ансамблях невзаимодействующих наночастиц, а двумя в общем случае различающимися на несколько порядков временами релаксации. Дипольное взаимодействие приводит к увеличению скорости магнитной релаксации по сравнению со случаем невзаимодействующих частиц, а сам процесс релаксации замедляется со временем. Причиной это-

го замедления является увеличение в процессе релаксации той составляющей потенциального барьера между равновесными направлениями магнитных моментов наночастиц, которая обусловлена их дипольным взаимодействием.

3. Развита новый метод численного моделирования магнитной релаксации в данных ансамблях, в максимальной степени учитывающий влияние диполь-дипольного взаимодействия наночастиц. Он базируется на точном выражении для вероятности переориентации магнитных моментов, полученном путем аналитического решения уравнения для времени переориентации, следующего из соответствующего обратного уравнения Фоккера-Планка, и на численной процедуре определения состояния ансамбля в дискретные моменты времени, которая в полной мере учитывает действие термостата. Наиболее важными свойствами этого метода являются: 1) практически точный учет магнитного диполь-дипольного взаимодействия наночастиц, что дает возможность выявить те особенности закона релаксации, которые обусловлены корреляционными эффектами; 2) нахождение закона релаксации как функции реального времени, а не шагов Монте-Карло, что позволяет избежать применения неоднозначной процедуры конвертирования этих шагов в интервалы времени; 3) чрезвычайно широкая область определения закона релаксации, верхняя граница которой может существенно превышать максимальное время релаксации системы. В настоящее время ни один из известных численных методов не обладает полным набором этих свойств.

4. Новым методом численного моделирования изучены особенности магнитной релаксации, обусловленные полем смещения, размерами ансамбля, динамическими корреляциями направлений магнитных моментов наночастиц и их пространственным распределением. Проведен сравнительный анализ результатов численного моделирования и результатов, полученных в рамках среднеполевой теории магнитной релаксации. Показано, что намагниченность таких систем сложным образом зависит от времени и в общем случае не может быть аппроксимирована логарифмической, степенной и замедленной экспоненциальной (*stretched exponential*) зависимостями, которые широко используются для изучения магнитной релаксации. Установлено, в частности, что динамические корреляции ускоряют релаксацию на малых временах, замедляют на больших, и в случае ненулевого поля смещения вносят заметный вклад в величину равновесной намагниченности системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. National nanotechnology initiative. Internal NSTC/CT/IWGN report. – Washington. – July, 2000.
2. Nanotechnology – Shaping the world atom by atom. NSTC report. I. Amato. – Washington. – September, 1999.
3. Societal implications of nanoscience and nanotechnology. NSET workshop report. Edited by M.C. Roco and W.S. Bainbridge. – Arlington. – March, 2001.
4. Moriarty Ph. Nanostructured materials // Rep. Prog. Phys. – 2001. – Vol.64. – P.297–381.
5. Вонсовский С.В. Магнетизм. – М.: Наука, 1971. – 1032с.
6. Wernsdorfer W. Classical and quantum reversal magnetization studied in nanometer-sized particles and clusters // Adv. Chem. Phys. – 2001. – Vol.118. – P.99-190.
7. Дорфман Я.Г. Беседы о магнетизме. – М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1950. – 78с.
8. Skomski R. Nanomagnets // J. Phys.: Condens. Matter. – 2003. – Vol.15. – P.R841-R896.
9. Горобец Ю.И., Вилесов Ю.Ф., Грошенко Н.А. Магнитооптические дифракционные решётки в оптоэлектронике. – М.: Издательский центр РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1998. – 348 с.
10. Барьяхтар В.Г., Горобец Ю.И. Цилиндрические магнитные домены и их решётки. – Киев: Наукова думка, 1988. – 168 с.
11. Martin J.I., Nogues J., Kai Liu, Vicent J.L., Schuller I.K. Ordered magnetic nanostructures: fabrication and properties // J. Magn. Magn. Mater. – 2003. – Vol.256. – P.449-501.
12. Otani Y., Seung Gu Kim, Kohda T., Fukamichi K., Kitakami O., Shimada Y. Magnetization reversal in submicron ferromagnetic dots and antidots arrays // IEEE Trans. Magn. – 1998. – Vol.34, №4. – P.1090-1092.
13. Fischer P.B., Chou S.Y. 10 nm electron beam lithography and sub-50 nm over-

- lay using a modified scanning electron microscope // *J. Appl. Phys.* – 1993. – Vol.62, №23. – P.2989-2991.
14. Smyth J.F., Schultz S., Kern D., Schmid H., Yee D. Hysteresis of submicron permalloy particulate arrays // *Appl. Phys. Lett.* – 1988. – Vol.63, №8. – P.4237-4239.
 15. Cowburn R.P., Adeyeye A.O., Welland M.E. Controlling magnetic ordering in coupled nanomagnet arrays // *New Journal of Physics.* – 1999. – Vol.1. – P.16.1-16.9.
 16. Cowburn R. P., Koltsov D.K., Adeyeye A.O., Welland M.E., Tricker D.M. Single-domain circular nanomagnets // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol.83, №5. – P.1042-1045.
 17. Sindhu S., Haast M.A.M., Ramstöck K., Abelmann L., Lodder J.C. Micromagnetic simulations of the domain structure and the magnetization reversal of $\text{Co}_{50}\text{Ni}_{50}/\text{Pt}$ multilayer dots // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2002. – Vol.238, №2-3. – P.246-251.
 18. Savas T.A., Farhoud M., Smith H.I., Hwang M., Ross C.A., Properties of large-area nanomagnet arrays with 100 nm period made by interferometric lithography // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol.85, №8. – P.6160-6162.
 19. Farhoud M., Hwang M., Smith H.I., Schattenburg M.L., Bae J.M., Youcef-Toumi K., Ross C.A. Fabrication of large area nanostructured magnets by interferometric lithography // *IEEE Trans. Magn.* – 1998. – Vol.34, №4. – P.1087-1089.
 20. Farhoud M., Ferrera J., Lochtefeld A.J., Murphy T.E., Schattenburg M.L., Carter J., Ross C.A., Smith H.I. Fabrication of 200 nm period nanomagnet arrays using interference lithography and a negative resist // *Vac. Sci. Technol. B.* – 1999. – Vol.17, №6. – P.3182-3185.
 21. Bessho K., Iwasaki Y., Hashimoto S. Fabricating nanoscale magnetic mounds using a scanning probe microscope // *J. Appl. Phys.* – 1996. – Vol.79, №8. – P.5057-5059.
 22. Wirth S., Field M., Awschalom D.D. Magnetization behavior of nanometer-

- scale iron particles // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol.57, №22. – P.14028-14031.
23. Wirth S., Heremans J.J, von Molnar S., Field M., Campman K.L., Gossard A.C., Awschalom D.D. Magnetic anisotropy in arrays of nanometer-scale iron particles // *IEEE Trans. Magn.* – 1998. – Vol.34, №4. – P.1105-1107.
 24. Schindler W., Hofmann D., Kirschner J. Nanoscale electrodeposition: A new route to magnetic nanostructures? // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol.87, №9. – P.7007-7009.
 25. Fruchart O., Klaua M., Barthel J., Kirschner J. Self-organized growth of nanosized vertical magnetic Co pillars on Au(111) // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol.83, №14. – P.2769-2772.
 26. Shen J., Skomski R., Klaua M., Jenniches H., Manoharan S., Kirschner J. Magnetism in one dimension: Fe on Cu(111) // *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol.56, №5. – P.2340-2343.
 27. Ohresser P., Ghiringhelli G., Tjernberg O., Brookes N.B., Finazzi M. Magnetism of nanostructures studied by x-ray magnetic circular dichroism: Fe on Cu(111) // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol.62, №9. – P.5803-5809.
 28. Vavassori P., Metlushko V., Grimsditch M., Ilic B., Neuzil P., Kumar R. Magneto-optical studies of superlattice dot arrays // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol.61, №9. – P.5895-5898.
 29. Carl A., Kirsch S., Lohau J., Weinforth H., Wassermann E.F., Magnetization reversal of nanostructured Co/Pt multilayer dots and films studied with magnetic force microscopy and MOKE // *IEEE Trans. Magn.* – 1999. – Vol.35, №5. – P.3106-3111.
 30. Costa-Krämer J.L., Anguita J., Martín J.I., Martínez-Boubeta C., Cebollada A., Briones F. Magnetic coupling in epitaxial Fe/MgO/Fe microtunnel junction arrays // *Nanotechnology.* – 2002. – Vol.13. – P.695-700.
 31. Smyth J.F., Schultz S., Kern D., Schmid H., Yee D. Hysteresis of submicron permalloy particulate arrays // *J. Appl. Phys.* – 1988. – Vol.63, №8. – P.4237-4239.
 32. Wernsdorfer W., Thirion C., Demoncey N., Pascard H., Mailly D. Magnetization

- reversal by uniform rotation (Stoner–Wohlfarth model) in FCC cobalt nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2002. – Vol.242-245, part1. – P.132-138.
33. Fruchart O., Nozières J.-P., Wernsdorfer W., Givord D., Rousseaux F., Decanini D. Enhanced coercivity in submicrometer-sized ultrathin epitaxial dots with in-plane magnetization. // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol.82, №6. – P.1305-1308.
 34. Sappey R., Vincent E., Ocio M., Hammann J. Disentangling distribution effects and nature of the dynamics in relaxation measurements: the RMR method // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2000. – Vol.221. – P.87-98.
 35. Lohau J., Kirsch S., Carl A., Wassermann E.F. Quantitative determination of the magnetization and stray field of a single domain Co/Pt dot with magnetic force microscopy // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – Vol.76, №21. – P.3094-3096.
 36. Girgis E., Schelten J., Shi J., Janesky J., Tehrani S., Goronkin H. Switching characteristics and magnetization vortices of thin-film cobalt in nanometer-scale patterned arrays // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – Vol.76, №25. – P.3780-3782.
 37. Kominis I.K., Kornack T.W., Allred J.C., Romalis M.V. A subfemtotesla multichannel atomic magnetometer // *Nature*. – 2003. – Vol.422. – P.596-599.
 38. Бухараев А.А., Овчинников Д.В., Нургаизов Н.И. и др. Исследование микромагнетизма и перемагничивания наночастиц Ni с помощью магнитного силового микроскопа. // *ФТТ*. – 1998. – Т.40, №7. – С.1277-1283
 39. Kirk K.J., Chapman J.N., Wilkinson C.D.W. Lorentz microscopy of small magnetic structures // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol.85, №8. – P.5237-5242.
 40. van Lierop J., Ryan D.H. Mössbauer spectra of single-domain fine particle systems described using a multiple-level relaxation model for superparamagnets // *Phys. Rev. B*. – 2001. – Vol.63. – 064406(13).
 41. Bødker F., Hansen M.F., Koch C.B., Lefmann K., Mørup S. Magnetic properties of hematite nanoparticles // *Phys. Rev. B*. – 2000. – Vol.61, №10. – P.6826-6838.
 42. Mørup S., Tronc E. Superparamagnetic relaxation of weakly interacting particles // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – Vol.72, №20. – P.3278-3281.
 43. Berry C.C., Curtis A.S.G. Functionalisation of magnetic nanoparticles for applications in biomedicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2003. – Vol.36. – P.R198-R206.

44. Tartaj P., del Puerto Morales M., Veintemillas-Verdaguer S., González-Carreño T., Serna C.J. The preparation of magnetic nanoparticles for applications in bio-medicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2003. – Vol.36. – P.R182-R197.
45. Pankhurst Q.A., Connolly J., Jones S.K., Dobson J. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2003. – Vol.36. – P.R167-R181.
46. Moser A., Takano K., Margulies D.T., Albrecht M., Sonobe Y., Ikeda Y., Sun S., Fullerton E.E Magnetic recording: advancing into the future // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2002. – Vol.35. – P.R157-R167.
47. Suzuki T., Tanaka T., Ikemizu K. High density recording capability for advanced particulate media // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2001. – Vol.235. – P.159-164.
48. Wood R., Sonobe Y., Jinc Z., Wilson B. Perpendicular recording: the promise and the problems // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2001. – Vol.235, №1-3. – P.1-9.
49. Takano H., Nishida Y., Kuroda A. et al. Realization of 52.5 Gb/in² perpendicular recording // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2001. – Vol.235, №1-3. – P.241-244.
50. Mallery M., Torabi A., Benakli M., One terabit per square inch perpendicular recording conceptual design // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.38, №4. – P.1719-1724.
51. Moritz J., Landis S., Toussaint J.C. et al. Patterned media made from pre-etched wafers: a promising route toward ultrahigh-density magnetic recording // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.38, №4. – P.1731-1736.
52. Wood R.W., Miles J., Olson T. Recording technologies for terabit per square inch systems // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.38, №4. – P.1711-1718.
53. Rettner C.T., Anders S., Thomson T., et al. Magnetic characterization and recording properties of patterned Co₇₀Cr₁₈Pt₁₂ perpendicular media // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.38, №4. – P.1725-1730.
54. Liu F., Stoev K., Luo P., et al. Perpendicular recording heads for extremely high-density recording // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.39, №4. – P.1942-1948.
55. Néel L. Théorie du trainage magnétique des ferromagnétiques en grains fins avec applications aux terres cuites // *Annales Géophysique.* – 1949. – Vol.5, №2. –

- P.99-136.
56. Brown W.F., Jr. Thermal fluctuations of a single-domain particle // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol.130, №5. – P.1677-1686.
 57. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. К теории дисперсии магнитной проницаемости ферромагнитных тел. – *Phys. Zs. Sowiet*, 1935; см перевод в кн. Ландау Л.Д. Собрание трудов, т.1. – М.: Наука, 1969. – С.128-143.
 58. Garanin D.A., Kennedy E.C., Crothers D.S.F., Coffey W.T. Thermally activated escape rates of uniaxial spin systems with transverse field: Uniaxial crossovers // *Phys. Rev. E.* – 1999. – Vol.60, №6. – P.6499-6502.
 59. Denisov S.I., Yunda A.N. Thermal-induced inversion of the magnetic moment in superparamagnetic particles // *Physica B.* – 1998. – Vol.245, №3. – P.282-287.
 60. Coffey W.T., Crothers D.S.F., Dormann J.L., Kalmykov Yu.P., Kennedy E.C., Wernsdorfer W. Thermally activated relaxation time of a single domain ferromagnetic particle subjected to a uniform field at an oblique angle to the easy axis: Comparison with experimental observations // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol.80, №25. – P.5655-5658.
 61. Braun H.-B. Kramers's rate theory, broken symmetries, and magnetization reversal // *J. Appl. Phys.* – 1994. – Vol.76, №10. – P.6310-6315.
 62. Klik I., Gunther L. First-passage-time approach to overbarrier relaxation of magnetization // *J. Stat. Phys.* – 1990. – Vol.60, №3/4. – P.473-484.
 63. Горобец Ю.И., Джежеря Ю.И., Кравец А.Ф. Магнитное упорядочение в гранулированной системе. // *ФТТ.* – 2000. – Т.42, №1. – С.121-125
 64. Jonsson T., Nordblad P., Svedlindh P. Dynamic study of dipole-dipole interaction effects in a magnetic nanoparticle system // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol.57, №1. – P.497-504.
 65. Dormann J.L., Bessais L., Fiorani D. A dynamic study of small interacting particles: superparamagnetic model and spin-glass laws // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1988. – Vol.21. – P.2015-2034.
 66. Prene P., Tronc E., Jolivet J.- P., Livage J., Cherkaoui R., Nogues M., Dormann J.-L., Fiorani D. Magnetic properties of isolated γ -Fe₂O₃ particles // *IEEE Trans.*

- Magn. – 1993. – Vol.29, № 6. – P.2658-2660.
67. Jönsson P., Hansen M.F., Nordblad P. Nonequilibrium dynamics in an interacting Fe-C nanoparticle system // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol.61, №2. – P.1261-1266.
 68. Spinu L., Tung L.D., Kolesnichenko V., Fang J., Stancu A., O'Connor C. J. Dynamics in nanoparticle systems with tuned strength of interactions // IEEE Trans. Magn. – 2002. – Vol.38, №5. – P.2607-2609.
 69. Dormann J.L., Cherkaoui R., Spinu L., Noguès M., Lucari F., D'Orazio F., Fiorani D., Garcia A., Tronc E., Jolivet J.P. From pure superparamagnetic regime to glass collective state of magnetic moments in γ -Fe₂O₃ nanoparticle assemblies // J. Magn. Magn. Mater. – 1998. – Vol.187. – P.L139-L144.
 70. del Muro M.G., Batlle X., Labarta A. Glassy behavior in magnetic fine particles // J. Magn. Magn. Mater. – 2000. – Vol.221. – P.26-31.
 71. Fannin P. C., Marin C.N., Malaescu I. The influence of particle concentration and polarizing field on the resonant behavior of magnetic fluids // J. Phys.: Condens. Matter. – 2003. – Vol.15. – P.4739-4750.
 72. Jönsson P., Jonsson T., Garcia-Palacios J.L., Svedlindh P. Nonlinear dynamic susceptibilities of interacting and noninteracting nanoparticle systems // J. Magn. Magn. Mater. – 1999. – Vol.222, №1-2. – P.219-226.
 73. Калмыков Ю.П., Титов С.В. К расчёту продольной магнитной восприимчивости // ФТТ. – 2003. – Т.45, №11. – С.2037-2042
 74. Калмыков Ю.П., Титов С.В. Комплексная магнитная восприимчивость одноосных суперпарамагнитных частиц в сильном магнитном поле // ФТТ. – 1998. – Т.40, №9. – С.1642-1649
 75. Russier V., Petit C., Legrand J., Pileni M.P. Collective magnetic properties of cobalt nanocrystals self-assembled in a hexagonal network: theoretical model supported by experiments // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol.62, №6. – P.3910-3916.
 76. Allia P., Coisson M., Knobel M., Tiberto P., Vinai F. Magnetic hysteresis based on dipolar interactions in granular magnetic systems // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol.60, №17. – P.12207-12218.
 77. Allia P., Coisson M., Moya J., Tiberto P., Vinai F. Granular metallic systems as

- interacting superparamagnets: anhysteretic magnetization and hysteresis loops // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2003. – Vol.254-255. – P.143-148.
78. Zysler R.D., Ramos C.A., De Biasi E., Romero H., Ortega A., Fiorani D. Effect of interparticle interactions in $(\text{Fe}_{0.26}\text{Ni}_{0.74})_{50}\text{B}_{50}$ magnetic nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2000. – Vol.221. – P.37-44.
79. Hansen M.F., Morup S. Models for the dynamic of interaction nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1998. – Vol.184. – P.262-274.
80. Luis F., Petroff F., Torres J.M., García L.M., Bartolomé J., Carrey J., Vaurès A. Magnetic relaxation of interacting Co clusters: crossover from two- to three-dimensional lattices // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol.88, №21. – P.7205-7208.
81. Kechrakos D., Trohidou K.N., Blackman J.A. Scaling behavior of the giant magnetoresistance of magnetic aggregates // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol.63. – 134422(5).
82. Russier V., Petit C., Legrand J., Pileni M.P. Collective magnetic properties of cobalt nanocrystals self-assembled in a hexagonal network: Theoretical model supported by experiments // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol.62, №6. – P.3910-3916.
83. Andersson J.-O., Djurberg C., Jonsson T., Svedlindh P., Nordblad P. Monte Carlo studies of the dynamics of an interacting monodisperse magnetic-particle system // *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol.56, №21. – P.13983-13988.
84. Sampaio L.C., Hyndman R., de Menezes F.S., Jamet J. P., Meyer P., Gierak J., Chappert C., Mathet V., Ferré J. Power-law relaxation decay in two-dimensional arrays of magnetic dots interacting by long-range dipole-dipole interactions // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol.64. – 184440(7).
85. García-Otero J., Porto M., Rivas J., Bunde A. Influence of dipolar interaction on magnetic properties of ultrafine ferromagnetic particles // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol.84, №1. – P.167-170.
86. Ribas R., Labarta A. Monte-Carlo simulation of magnetic relaxation in small particle system with dipolar interaction // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1996. – Vol.157-158. – P.351-352.
87. El-Hilo M., Shatnawy M., Al-Rsheed A. Modeling of interaction effects in

- granular systems // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2000. – Vol.221. – P.137-148.
88. Kechrakos D., Trohidou K.N. Magnetic properties of dipolar interacting single-domain particles // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol.58, №18. – P.12169-12177.
 89. Chantrell R.W., Walmsley N., Gore J., Maylin M. Calculations of the susceptibility of interacting superparamagnetic particles // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol.63. – 024410(13).
 90. Chantrell R.W., Hannay J.D., Wongsam M., Schrefl T. Computational approaches to thermally activated fast relaxation // *IEEE Trans. Magn.* – 1998. – Vol.34, №4. – P.1839-1844.
 91. González J.M., Ramires R., Smirnov-Rueda R., González J. Non-Arrhenius relaxation in micromagnetic models of systems with many degrees of freedom: Experiments and related simulations // *Phys Rev. B.* – 1995. – Vol.52, №22. – P.16034-16040.
 92. González J.M., Ramires R., Smirnov-Rueda R., González J. Modelling the time dependence of the magnetization in a system with many degrees of freedom // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1996. – Vol.157-158. – P.363-365.
 93. Suran G., Arnaudas J.I., Ciria M., de la Fuente C., Rivoire M., Chubykalo O.A. González J.M. Evidences of non-Arrhenius magnetic relaxation in macroscopic systems: Experiments and related simulations // *Europhys. Lett.* – 1998. – Vol.41, №6. – P.671-676.
 94. Lottis D.K., White R.M., Dan Dahlberg E. Model system for slow dynamics // *Phys. Rev. Lett.* – 1991. – Vol. 67, №3. – P.362-265.
 95. Samwel E.O., Bissell P.R., Lodder J.C. Remanent magnetic measurements on perpendicular recording materials with compensation for demagnetizing fields // *J. Appl. Phys.* – 1993. – Vol.73, №3. – P.1353-1359.
 96. van de Veerdonk R.J.M., Wu X., Weller D. Determination of switching field distributions for perpendicular recording media // *IEEE Trans. Magn.* – 2003. – Vol.39, №1. – P.590-593.
 97. García-Palacios J. L. and Lázaro F.J. Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol.58, №22 –

- P.14937-14958.
98. Berkov D.V., Gorn N. L., and Görnert P. Magnetization dynamics in nanoparticle systems: numerical simulation using Langevin dynamics // *Phys. Status Solidi A*. - 2002. – Vol.189, №2. – P.409-421.
 99. Kanai Y., Charap S.H. Simulation of magnetic aftereffect in particulate recording media // *IEEE Trans. Magn.* – 1991. – Vol.27, №6. – P.4972-4974.
 100. Smirnov-Rueda R., Hannay J.D., Chubycalo O., Chantrell R.W., Gonzalez J.M. Simulation of magnetic relaxation by a Monte Carlo technique with correlations and quantified time step // *IEEE Trans. Magn.* – 1999. – Vol.35, №5. – P.3730-3732.
 101. Chubycalo O.A., Lengsfeld B., Jones B., Kaufman J., Gonzalez J.M. Chantrell R.W., Smirnov-Rueda R. Micromagnetic modeling of thermal decay in interacting systems // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2000. – Vol.221. – P.132-136.
 102. Lyberatos A., Chantrell R.W. Thermal fluctuations in a pair of magnetostatically coupled particles // *J. Appl. Phys.* – 1993. – Vol.73, №10. – P.6501-6503.
 103. Lyberatos A., Berkov D.V., Chantrell R.W. A method for numerical simulation of the thermal magnetization fluctuations in micromagnetics // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1993. – Vol.5. – P.8911-8920.
 104. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: Пер. с англ. / Под ред. Ахманова А.С. – М: Наука. – 1990. – 176 с.
 105. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: в 2-х частях. Часть 2: Пер. с англ. – М.: Мир. 1990. – 400 с.
 106. Nowak U., Chantrell R.W., Kennedy E.C. Monte Carlo simulation with time step quantification in terms of Langevin dynamics // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol.84, №1. – P.163-166.
 107. Hinzke D., Nowak U. Magnetic relaxation in a classical spin chain // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol.61, №10. – P.6734-6740.
 108. Тихонов В. И. Миронов М.А. Марковские процессы. – М.: «Сов. радио». 1977. – 488 с.
 109. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках / Пер. с англ.

- М.: Мир. 1986. – 528с.
110. Chubykalo O., Nowak U., Smirnov-Rueda R., Wongsam M.A., Chantrell R.W., Gonzalez J.M. Monte Carlo technique with a quantified time step: Application to the motion of magnetic moments // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol.67. – 064422(10).
 111. Pu-Ling Lu, Charap S.H. Thermal instability at 10 Gbit/in² magnetic recording // *IEEE Trans. Magn.* – 1994. – Vol.30, №6. – P.4230-4232.
 112. Haginoya C., Heike S., Ishibashi M., Nakamura K., Koike K. Magnetic nanoparticle array with perpendicular crystal magnetic anisotropy // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol.85, №12. – P.8327-8331.
 113. Dennis C.L., Borges R.P., Buda L.D., Ebels U., et al. The defining length scales of mesomagnetism: a review // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2002. – Vol.14. – P.R1175-R1262
 114. Stoner E.C., Wohlfarth E.P. A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys // *Phys. Dept., Univ. of Leeds, UK.* – 1948 (Переиздано в *IEEE Trans. Magn.* – 1991. – Vol.27, №4. – P.3475-3518).
 115. Wernsdorfer W., Orozco E.B., Hasselbach K. et. al. Experimental evidence of the Néel-Brown model of magnetization reversal // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol.78, №9. – P.1791-1794.
 116. Wernsdorfer W., Orozco E.B., Hasselbach K. Macroscopic quantum tunneling of magnetization of single ferrimagnetic nanoparticles of barium ferrite // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol.79, №20. – P.4014-4017.
 117. Chudnovsky E.M. and Gunther L. Quantum tunneling of magnetization in small ferromagnetic particles // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol.60, №8. – P.661-664.
 118. Batlle X., Labarta A. Finite-size effects in fine particles: magnetic and transport properties // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2002. – Vol.35. – P.R15-R42.
 119. Fitzsimmons M.R., Bader S.D., Borchers J.A. et. al. Neutron scattering studies of nanomagnetism and artificially structured materials // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2004. – Vol.271. – P.103-146.
 120. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. – М.: Наука. – 1967, 368 с.

121. Барьяхтар В.Г. Феноменологическое описание релаксационных процессов в магнетиках // ЖЭТФ. – 1984. – Т.87, №4. – С.1501-1508.
122. Барьяхтар В.Г. Теория релаксации динамических солитонов в ферромагнетиках // Письма в ЖЭТФ. – 1985. – Т.42, №2. – С.49-51.
123. Проблемы теоретической физики: Сб. научн. тр. – К.: Наукова думка, 1986. – С. 48-66.
124. Киттель Ч. Введение в физику твёрдого тела. Пер. с англ. под ред. Гусева А.А. – М.: Наука, 1978г. – 792 с.
125. Денисов С.И., Лютый Т.В., Нефедченко В.Ф. Магнитная релаксация в двумерных ансамблях наночастиц: приближение среднего поля // Металлофиз. новейшие технол. – 2002. – Т.24, №1.– С.17-24.
126. Stratonovich R.L. A new representation for stochastic integrals and equations // SIAM J. Control. – 1966. – Vol.4. – P.362.
127. Олвер Ф. Введение в асимптотические методы и специальные функции. – М.: Наука, 1978. – 376 с.
128. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
129. Denisov S.I., Lyutyu T.V., Trohidou K.N. Magnetic relaxation in two-dimensional nanoparticle ensembles // Phys. Rev. B – 2003. – Vol.67. – 014411(9).
130. Денисов С.И., Лютый Т.В., Trohidou K.N. Численное моделирование магнитной релаксации в двумерных ансамблях наночастиц // Тонкие пленки в оптике и электронике. Харьковская научная ассамблея, ISTFE-14. – 2002. – С.38-42.
131. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. – Пер. с нем. – М.: Наука. 1976, – 576с.
132. Денисов С.И., Лютый Т.В. Корреляционные эффекты в релаксации намагниченности двумерных решеток наночастиц // Металлофиз. новейшие технол. – 2004. – Т.26, №3. – С.1001-1008.
133. Denisov S.I., Lyutyu T.V., Trohidou K.N. Dipolar interaction effects on the thermally activated magnetic relaxation of two-dimensional nanoparticle en-

- sembles // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – Vol.84, №23. – P.4672-4674.
134. Лютый Т.В. Релаксация намагниченности в двумерных ансамблях наночастиц в поле смещения // *Вестник СумГУ.* – 2003. – №10(56). – С.51-58.
135. Labarta A., Iglesias O., Balcells L. and Badia F. Magnetic relaxation in small-particle systems // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol.48, №14. – P.10240-10246.
136. Rizzo N.D., Silva T.J., and Kos A.B. Relaxation times for magnetization reversal in a high coercivity magnetic thin film // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol.83, №23. – P.4876-4879.
137. Chowdhury D. and Mookerjee A. Logarithmic relaxation of magnetization in the percolation model of the spin-glass transition // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1984. – Vol.14. – P.245-249.
138. Taniyama T. and Nakatani I. Magnetic relaxation in $\text{Ga}_{0.6}\text{Mo}_2\text{S}_4$ spinel // *J. Appl. Phys.* – 1998. – Vol.83, №11. – P.6323-6325.
139. Denisov S.I., Lyuty T.V., Trohidou K.N. Thermal decay of the magnetization in two-dimensional nanoparticle ensembles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2004. – Vol.272-276. – P.665-666.
140. Ulrich M., Garcia-Otero J., Rivas J. and Bunde A. Slow relaxation in ferromagnetic nanoparticles: Indication of spin-glass behavior // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol.67. – 024416(4).
141. Chamberlin R. V., Mozurkewich G. and Orbach R. Time decay of the remanent magnetization in spin-glasses // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol.52, №10. – P.867-870.
142. van de Veerdonk R.J.M., Wu X.W., Chantrell R.W. and Miles J.J. Slow dynamics in perpendicular media // *IEEE Trans. Magn.* – 2002. – Vol.38, №4. – P.1676-1681.
143. Kodama R.H. Magnetic nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1999. – Vol.200. – P.359-372.
144. El-Hilo M., Shatnawy M., Al-Rsheed A. Modeling of interaction effects in granular systems // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2000. – Vol.221. – P.137-148.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Соответствие между стохастическим уравнением Ландау-Лифшица и уравнением Фоккера-Планка

Для установления соответствия между одним из стохастических дифференциальных уравнений (2.10) и уравнением Фоккера-Планка (1.6) будем считать, что (2.10) рассматривается как результат предельного перехода $\delta t \rightarrow 0$ в неявной разностной схеме (здесь под i -ой координатой следует понимать азимутальный или полярный угол произвольного магнитного момента)

$$\delta\psi_i(t_n) = f_i\{\psi(t_{n-1})\}\delta t + g_{ik}\{\tilde{\psi}\}\delta V_k(t_n) \quad (\text{A.1})$$

где $\delta\psi_i(t_n) = \psi_i(t_n) - \psi_i(t_{n-1})$;

$$\delta t = t_n - t_{n-1};$$

$$\tilde{\psi}_i = \chi\psi_i(t_n) + (1-\chi)\psi_i(t_{n-1}), \quad 0 \leq \chi \leq 1;$$

$\delta V_k(t_n) = V_k(t_n) - V_k(t_{n-1})$ – приращения винеровского процесса, характеризующиеся соотношениями $\langle \delta V_k(t_n) \rangle = 0$ и

$$\langle \delta V_k(t_n) \delta V_s(t_m) \rangle = 2\Delta\delta t \delta_{nm} \delta_{ks}.$$

Введём в рассмотрение некоторую функцию $E(t) = E\{\psi(t)\} = E(\psi_1(t), \psi_2(t), \dots, \psi_{2N}(t))$, и найдём её приращение как

$$\delta E\{\psi(t_n)\} = E\{\psi(t_{n-1}) + \delta\psi(t_n)\} - E\{\psi(t_{n-1})\} \quad (\text{A.2})$$

Разложив в ряд Тейлора первое слагаемое правой части (A.2) до квадратичного члена, получим

$$\delta E(t_n) \approx \frac{\partial E(t_{n-1})}{\partial \psi_i(t_{n-1})} \delta\psi_i(t_n) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E(t_{n-1})}{\partial \psi_i(t_{n-1}) \partial \psi_j(t_{n-1})} \delta\psi_i(t_n) \delta\psi_j(t_n) \quad (\text{A.3})$$

Представим функцию $g_{ik}\{\tilde{\psi}\}$ в виде $g_{ik}\{\tilde{\psi}\} = g_{ik}\{\psi(t_{n-1}) + \chi\delta\psi(t_n)\}$ и разложим её в ряд Тейлора до линейных членов

$$g_{ik}\{\tilde{\psi}\} \approx g_{ik}\{\psi(t_{n-1})\} + \chi \frac{\partial g_{ik}\{\psi(t_{n-1})\}}{\partial \psi_m(t_{n-1})} \delta \psi_m(t_n) \quad (\text{A.4})$$

Подставим (A.1) и (A.4) в (A.3), пренебрегая членами, содержащими δt^β , $\beta > 1$. Получим следующее выражение (здесь и далее аргумент t_{n-1} опускаем):

$$\begin{aligned} \delta E(t_n) = & \frac{\partial E}{\partial \psi_i} \left[f_i\{\psi\} \delta t + g_{ik}\{\psi\} \delta V_k(t_n) + \lambda \frac{\partial g_{ik}\{\psi\}}{\partial \psi_m} g_{ms}\{\psi\} \delta V_k(t_n) \delta V_m(t_n) \right] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \psi_i \partial \psi_j} g_{ik}\{\psi\} g_{js}\{\psi\} \delta V_k(t_n) \delta V_s(t_n) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Следующим этапом усредним $\delta E(t_n)$. Под средним $\langle \delta E(t_n) \rangle$ следует понимать среднее по реализациям δV_k при фиксированных $\psi_k(t_{n-1})$, и среднее по $\psi_k(t_{n-1})$. Вычислим сначала среднее первого типа

$$\langle \delta E(t_n) \rangle_V = \frac{\partial E}{\partial \psi_i} \left[f_i\{\psi(t_{n-1})\} \delta t + 2\chi \Delta \frac{\partial g_{ik}\{\psi\}}{\partial \psi_m} g_{mk}\{\psi\} \right] + \Delta \delta t \frac{\partial^2 E}{\partial \psi_i \partial \psi_j} g_{ik}\{\psi\} g_{jk}\{\psi\} \quad (\text{A.6})$$

Среднее второго типа необходимо вычислять через некоторую плотность вероятности

$$\langle \delta E(t_n) \rangle = \int_R \langle \delta E(t_n) \rangle_V P\{\psi, t_{n-1}\} d\{\psi\} \quad (\text{A.7})$$

где R – произвольный объём в ψ -пространстве, $R \rightarrow \infty$;

$$d\{\psi\} = d\psi_1 d\psi_2, \dots, d\psi_{2N}.$$

Интегрируя это выражение, получаем

$$\langle \delta E(t_n) \rangle = \delta t \int_R E \left[\begin{aligned} & - \frac{\partial}{\partial \psi_i} (P\{\psi, t_{n-1}\} f_i\{\psi\}) - \\ & - 2\lambda \Delta \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left(P\{\psi, t_{n-1}\} g_{mk}\{\psi\} \frac{\partial g_{ik}\{\psi\}}{\partial \psi_m} \right) - \\ & - \Delta \frac{\partial^2}{\partial \psi_i \partial \psi_j} (g_{ik}\{\psi\} g_{jk}\{\psi\} P\{\psi, t_{n-1}\}) \end{aligned} \right] \cdot d\{\psi\} + S', \quad (\text{A.8})$$

где S' – интеграл по поверхности.

С другой стороны,

$$\langle E\{\psi(t_n)\} \rangle = \int_R E\{\psi(t_n)\} P\{\psi(t_n), t_n\} d\{\psi(t_n)\} = \int_R E\{\psi(t_{n-1})\} P\{\psi(t_{n-1}), t_n\} d\{\psi(t_{n-1})\},$$

поэтому

$$\delta U\{t_n\} = \delta t \int_R U\{\psi(t_{n-1})\} \frac{\partial P\{\psi(t_{n-1}), t_{n-1}\}}{\partial t} d\{\psi(t_{n-1})\} \quad (\text{A.9})$$

Сравнивая (A.8) и (A.9) и учитывая произвольность функции $E(t)$, в пределе $\delta t \rightarrow 0$ получаем уравнение Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P\{\psi, t\}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi_i} \left[- \left(f_i\{\psi\} + 2\chi\Delta \frac{\partial g_{ik}\{\psi\}}{\partial \psi_m} g_{mk}\{\psi\} \right) P\{\psi, t\} + \Delta \frac{\partial}{\partial \psi_j} (g_{ik}\{\psi\} g_{jk}\{\psi\} P\{\psi, t\}) \right], \quad (\text{A.10})$$

устанавливающее связь с уравнением (2.10).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б**Текст программы на языке Delphi**

```
unit Unit1;
interface
uses
    Windows, Messages, SysUtils, Classes, Graphics, Controls, Forms, Dialogs,
    StdCtrls, ComCtrls, FileCtrl, ExtCtrls, IniFiles, Math;
type
    TForm1 = class(TForm)
        PageControl1: TPageControl;
        TabSheet1: TTabSheet;
        TabSheet2: TTabSheet;
        OpenDialog1: TOpenDialog;
        SaveDialog1: TSaveDialog;
        Panel1: TPanel;
        Edit4: TEdit;
        Panel2: TPanel;
        Edit5: TEdit;
        Edit6: TEdit;
        Label4: TLabel;
        Edit7: TEdit;
        Edit8: TEdit;
        Label1: TLabel;
        Label2: TLabel;
        Label3: TLabel;
        Label5: TLabel;
        Label6: TLabel;
        Label7: TLabel;
        Label8: TLabel;
        Label9: TLabel;
        Run: TButton;
        LabelErr: TLabel;
        Exit: TButton;
        Next: TButton;
        LabelPath: TLabel;
        TabSheet3: TTabSheet;
        Panel3: TPanel;
        Label10: TLabel;
        Label11: TLabel;
        Label12: TLabel;
        Label13: TLabel;
        Label14: TLabel;
        Break: TButton;
        StatusBar1: TStatusBar;
        Label15: TLabel;
        Label16: TLabel;
        Label17: TLabel;
```

```

Label18: TLabel;
Label19: TLabel;
Edit12: TEdit;
Edit14: TEdit;
Edit16: TEdit;
Edit15: TEdit;
Edit13: TEdit;
Edit3: TEdit;
Edit1: TEdit;
Edit2: TEdit;
Edit9: TEdit;
Edit10: TEdit;
Edit11: TEdit;
Edit17: TEdit;
Label20: TLabel;
ComboBox1: TComboBox;
ComboBox2: TComboBox;
Label21: TLabel;
Label22: TLabel;
ComboBox3: TComboBox;
Label23: TLabel;
Edit18: TEdit;
Label24: TLabel;
EditPath: TEdit;
Panel4: TPanel;
CheckBox1: TCheckBox;
Edit19: TEdit;
Label25: TLabel;
Edit20: TEdit;
Label27: TLabel;
CheckBox2: TCheckBox;
Label26: TLabel;
Edit21: TEdit;
Label28: TLabel;
Edit22: TEdit;
procedure FormCreate(Sender: TObject);
procedure RunClick(Sender: TObject);
procedure ExitClick(Sender: TObject);
procedure InputEditChange1(Sender: TObject);
procedure InputEditChange2(Sender: TObject);
procedure InputEditChange3(Sender: TObject);
procedure NextClick(Sender: TObject);
procedure BreakClick(Sender: TObject);
procedure FormCloseQuery(Sender: TObject; var CanClose: Boolean);
private
  procedure WMSendCommand(var message: TMessage); message CM_BASE+300;
public
  { Public declarations }
end;
procedure ReadFromIni(path:String);
var
  Form1: TForm1;

```

```

path:String;
flag:Boolean;

implementation
uses Unit2;
const kb=1.38E-16;
      gamma=1.766324E+7;

var d,r,Tmpr,p,lambda,m,Ha,Hex,z,part,
    a,tr,ro,ro1,dif_ro,ro00,H,H0,dzetta,b0,b,Bpl,Bmn,C,
    Hmax,Hmin,
    t,t1,dt,t_max,t_norm,
    tau0,tau00,
    dNpl,dNmn,S1,S2:Extended;
    AddH2x,AddH2y:Array[0..6]of Extended;
    L,Ex,Ex_old,Add_Ex,i,Xi,Yi,Xj,Yj,i1,i2,CStep,Steps,Npl: Integer;
    N:LongInt;
    {Lat,Lat1,Lats:^ShortInt;}
    Lat:Array[0..200,0..200]of ShortInt;
    w:Array[0..200,0..200]of Extended;
    pt,pt1,pts,pro,pro1,pros:^Extended;
    ParamFile:TIniFile;
    dat,temp,rof,tf,Latf,Latfl:Text;
    Time1,TurnOffTime:TTime;
    distance:function(AddX,AddY:Extended):Extended;
    field:function:Extended;
    x,d1:Extended;
    q,q1:ShortInt;
    AddX,AddY:Integer;

{$R *.DFM}
procedure TForm1.WMSendCommand;
begin
  OpenDialog1.InitialDir:=ParamStr(0);
  SaveDialog1.InitialDir:=ParamStr(0);
  Form2.ShowModal;
end;

procedure ReadFromIni(path:String);
begin
  ParamFile:=TIniFile.Create(ChangeFileExt(path,'.ini'));
  Form1.Edit1.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','L','100');
  Form1.Edit2.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','d','3');
  Form1.Edit3.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','T','300');
  Form1.Edit4.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','p','1');
  Form1.Edit5.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','lambda','0.2');
  Form1.Edit6.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','r','4E-7');
  Form1.Edit7.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','m/V','1400');
  Form1.Edit8.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','Ha','6400');
  Form1.Edit20.Text:=ParamFile.ReadString('Systems parameters','Hex','0');
  if ParamFile.ReadString('Systems parameters','Approximation','Mean field')=
    'Mean field' then Form1.ComboBox1.ItemIndex:=0 else Form1.ComboBox1.ItemIndex:=1 ;

```

```

if ParamFile.ReadString('Systems parameters','Type of lattice','Square')=
'Square' then Form1.ComboBox2.ItemIndex:=0 else
if ParamFile.ReadString('Systems parameters','Type of lattice','Square')=
'Hexagonal1' then Form1.ComboBox2.ItemIndex:=1 else
Form1.ComboBox2.ItemIndex:=2;
if ParamFile.ReadString('Simulations parameters','Boundaries','Periodic2')=
'Free' then Form1.ComboBox3.ItemIndex:=0 else
if ParamFile.ReadString('Simulations parameters','Boundaries','Periodic2')=
'Periodic1' then Form1.ComboBox3.ItemIndex:=1 else Form1.ComboBox3.ItemIndex:=2;
Form1.Edit9.Text:=ParamFile.ReadString('Simulations parameters','part','0.005');
Form1.Edit10.Text:=ParamFile.ReadString('Simulations parameters','z','0.2');
Form1.Edit11.Text:=ParamFile.ReadString('Simulations parameters','Ex','10');
N:=ParamFile.ReadInteger('Simulations parameters','N',0);
Steps:=ParamFile.ReadInteger('Simulations parameters','Steps',0);
CStep:=ParamFile.ReadInteger('Simulations parameters','CStep',0);
Ex_old:=StrToInt(Form1.Edit11.Text);
ParamFile.Destroy;
end;

```

```

procedure SaveToIni(path:String;Ex:Integer);

```

```

begin

```

```

ParamFile:=TIniFile.Create(ChangeFileExt(path,'.ini'));
ParamFile.WriteString('Systems parameters','L',Form1.Edit1.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','d',Form1.Edit2.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','T',Form1.Edit3.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','p',Form1.Edit4.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','lambda',Form1.Edit5.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','r',Form1.Edit6.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','m/V',Form1.Edit7.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','Ha',Form1.Edit8.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','Hex',Form1.Edit20.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','Approximation',Form1.ComboBox1.Text);
ParamFile.WriteString('Systems parameters','Type of lattice',Form1.ComboBox2.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','Tau0',Form1.Edit13.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','Tau00',Form1.Edit15.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','Taun',Form1.Edit17.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','dzeta',Form1.Edit16.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','b0',Form1.Edit21.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','ro00',Form1.Edit22.Text);
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','a',FloatToStr(a));
ParamFile.WriteString('Relaxations parameters','tr',FloatToStr(tr));
ParamFile.WriteString('Simulations parameters','Boundaries',Form1.ComboBox3.Text);
ParamFile.WriteString('Simulations parameters','part',Form1.Edit9.Text);
ParamFile.WriteString('Simulations parameters','z',Form1.Edit10.Text);
ParamFile.WriteInteger('Simulations parameters','Ex',Ex);
ParamFile.WriteInteger('Simulations parameters','N',N);
ParamFile.WriteInteger('Simulations parameters','Steps',Steps);
ParamFile.WriteInteger('Simulations parameters','CStep',i1);
ParamFile.Destroy;

```

```

end;

```

```

procedure SafeReadInt(Source:String);

```

```

var i:Integer;
begin
  try
    i:=StrToInt(Source)
  except
    on EConvertError do Form1.LabelErr.Visible:=True
  end
end;

```

```

procedure SafeReadFloat(Source:String);
var x:Extended;
begin
  try
    x:=StrToFloat(Source)
  except
    on EConvertError do Form1.LabelErr.Visible:=True
  end
end;

```

```

procedure ReadParameters;
begin
  L:=StrToInt(Form1.Edit1.Text);
  if Form1.ComboBox2.ItemIndex>0 then
    if (L mod 2)=0 then L:=L+1;
  Form1.Edit1.Text:=IntToStr(L);
  d:=StrToFloat(Form1.Edit2.Text);
  Tmpr:=StrToFloat(Form1.Edit3.Text);
  p:=StrToFloat(Form1.Edit4.Text);
  lambda:=StrToFloat(Form1.Edit5.Text);
  r:=StrToFloat(Form1.Edit6.Text);
  m:=StrToFloat(Form1.Edit7.Text);
  Ha:=StrToFloat(Form1.Edit8.Text);
  Hex:=StrToFloat(Form1.Edit20.Text);
  part:=StrToFloat(Form1.Edit9.Text);
  Ex:=StrToInt(Form1.Edit11.Text);
  if Ex=0 then begin Add_Ex:=2;Form1.Edit11.Text:='2' end
  else Add_Ex:=0;
  z:=StrToFloat(Form1.Edit10.Text);
end;

```

```

function TSPL(H:Extended):Extended;
begin
  TSPL:=0.5*tr*Sqrt(pi/a)*exp(a*Sqr(1+H/Ha))/((1-Sqr(H/Ha))*(1+H/Ha))
end;

```

```

function TSMN(H:Extended):Extended;
begin
  TSMN:=0.5*tr*Sqrt(pi/a)*exp(a*Sqr(1-H/Ha))/((1-Sqr(H/Ha))*(1-H/Ha))
end;

```

```

function distance_H(AddX,AddY:Extended):Extended;
begin

```

```

distance_H:=d*Sqrt(Sqr(Xi-Xj-AddX+0.5*(Yi-Yj-AddY))+0.75*Sqr(Yi-Yj-AddY))
end;

function distance_S(AddX,AddY:Extended):Extended;
begin
distance_S:=d*Sqrt(Sqr(Xi-Xj-AddX)+Sqr(Yi-Yj-AddY))
end;

function field_FBC:Extended;
begin
d1:=distance(0,0);
Result:=m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1)
end;

function field_H2_FBC:Extended;
begin
if not (((Yi<(L-1)/2)and(Xi<(L-1)/2-Yi)) or
((Yi>(L-1)/2)and(Xi>3*(L-1)/2-Yi))) and
not (((Yj<(L-1)/2)and(Xj<(L-1)/2-Yj)) or
((Yj>(L-1)/2)and(Xj>3*(L-1)/2-Yj))) then
begin
d1:=distance(0,0);
Result:=m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1)
end
else Result:=0;
end;

function field_PBC1:Extended;
begin
x:=0;
for q:=-1 to 1 do
for q1:=-1 to 1 do
begin
d1:=distance(L*q1,L*q);
x:=x+m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1)
end;
end;
Result:=x;
end;

function field_PBC2:Extended;
begin
d1:=2*L*d;
{AddX:=0;AddY:=0;
if (i mod L)<((L-1)div 2) then AddX:=-L;
if (i mod L)>((L-1)div 2) then AddX:=L;
if (i div L)<((L-1)div 2) then AddY:=-L;
if (i div L)>((L-1)div 2) then AddY:=L;
if Abs((i mod L)-(j mod L))<=((L-1)div 2) then AddX:=0;
if Abs((i div L)-(j div L))<=((L-1)div 2) then AddY:=0;
Result:=m*Lat1^/exp(3*ln(distance(AddX,AddY)));}
for q:=-1 to 1 do
for q1:=-1 to 1 do

```

```

begin
  if distance(L*q1,L*q)<d1 then d1:=distance(L*q1,L*q);
  if d1<=d*(L-1)/2 then break
end;
Result:=m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1);
end;

```

```

function field_H2_PBC1:Extended;
begin
  if not (((Yi<(L-1)/2)and(Xi<(L-1)/2-Yi)) or
    ((Yi>(L-1)/2)and(Xi>3*(L-1)/2-Yi))) and
    not (((Yj<(L-1)/2)and(Xj<(L-1)/2-Yj)) or
    ((Yj>(L-1)/2)and(Xj>3*(L-1)/2-Yj))) then
  begin
    x:=0;
    for q:=0 to 6 do
      begin
        d1:=distance(AddH2x[q],AddH2y[q]);
        x:=x+m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1);
      end;
    Result:=x;
  end else Result:=0;
end;

```

```

function field_H2_PBC2:Extended;
begin
  if not (((Yi<(L-1)/2)and(Xi<(L-1)/2-Yi)) or
    ((Yi>(L-1)/2)and(Xi>3*(L-1)/2-Yi))) and
    not (((Yj<(L-1)/2)and(Xj<(L-1)/2-Yj)) or
    ((Yj>(L-1)/2)and(Xj>3*(L-1)/2-Yj))) then
  begin
    d1:=2*L*d;
    for q:=0 to 6 do
      begin
        if distance(AddH2x[q],AddH2y[q])<d1 then d1:=distance(AddH2x[q],AddH2y[q]);
        if d1<=d*(L-1)*Sqrt(3)/4 then break
      end;
    Result:=m*Lat[Xj,Yj]/(d1*d1*d1);
  end
  else Result:=0;
end;

```

```

procedure Preparation;

```

```

function F(x:Extended):Extended;
begin
  H:=H0*x+Hex;
  F:=-x*(1/TSPL(H)+1/TSMN(H))-1/TSPL(H)+1/TSMN(H)
end;

```

```

procedure Rungekut;
var K1,K2,K3,K4,H:Extended;

```

```

begin
  K1:=F(ro);
  K2:=F(ro+dt/2*K1);
  K3:=F(ro+dt/2*K2);
  K4:=F(ro+dt*K3);
  ro:=ro+dt*(K1+2*K2+2*K3+K4)/6
end;

function LowestRo:Extended; {Metod polovinnogo deleniya}
var a,b,x,Fa,Fb,Fx,ksi,H:Extended;
begin
  If Hex<>0 then
  begin
    ksi:=10E-8; {tochnoct'}
    a:=-1;b:=1;
    while abs(a-b)>ksi do
    begin
      x:=(a+b)/2;
      Fa:=F(a); Fb:=F(b); Fx:=F(x);
      if Fa*Fx<0 then b:=x else a:=x;
    end;
    Result:=x
  end
  else Result:=0
end;

begin
  AddH2x[0]:=0; AddH2x[1]:=-(L+1)/2; AddH2x[2]:=-L; AddH2x[3]:=-(L-1)/2;
  AddH2x[4]:=(L+1)/2; AddH2x[5]:=L; AddH2x[6]:=(L-1)/2;
  AddH2y[0]:=0; AddH2y[1]:=-(L-1)/2; AddH2y[2]:=(L+1)/2; AddH2y[3]:=L;
  AddH2y[4]:=(L-1)/2; AddH2y[5]:=-(L+1)/2; AddH2y[6]:=-L;
  if Form1.ComboBox2.ItemIndex=0 then begin S1:=1.1291; S2:=0.5824; distance:= distance_S end
  else begin S1:=1.3793; S2:=0.5824; distance:=distance_H end;
  if Form1.ComboBox1.ItemIndex=0 then DELTA:=DELTA_MF
  else DELTA:=DELTA_F;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=0)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex<2) then field:=field_FBC;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=0)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex=2) then field:=field_H2_FBC;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=1)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex<2) then field:=field_PBC1;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=1)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex=2) then field:=field_H2_PBC1;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=2)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex<2) then field:=field_PBC2;
  if (Form1.ComboBox3.ItemIndex=2)and(Form1.ComboBox2.ItemIndex=2) then field:=field_H2_PBC2;
  d:=d*r;
  m:=m*((4/3)*pi*r*r*r);
  H0:=- (8*S1*p*m)/(d*d*d);
  dzetta:=-H0/Ha;

```

```

b0:=Hex/Ha;
H:=H0+Hex;
tr:=2/(lambda*gamma*Ha);
a:=(Ha*m)/(2*kb*Tmpr);
tau0:=tr*Sqrt(pi/a)*exp(a*Sqr(1-dzetta+b0))/(4*(1-Sqr(b0- dzetta))*(1-dzetta+b0));
ro00:=LowestRo;
b:=-dzetta*ro00+b0;
Bpl:=(1+b)*(1-b*b); Bmn:=(1-b)*(1-b*b);
C:=exp(a*Sqr(1+b));
tau00:=tr*Sqrt(pi/(a*)*C*0.5/(Bpl*(1+2*a*dzetta*(1+b)*(1+ro00))+
    Bmn*exp(4*a*b)*(1-2*a*dzetta*(1-b)*(ro00-1))-
    (ro00+1)*(-2*dzetta*b+dzetta-3*dzetta*b*b)+
    (ro00-1)*exp(4*a*b)*(2*dzetta*b+dzetta-3*dzetta*b*b));
t_norm:=(tr*Sqrt(pi/a)*exp(a*Sqr(1+b0)))/(2*(1-b0*b0)*((1+b0)+exp(4*a*b0)*(1-b0)));
t_max:=z*t_norm;
Form1.Edit13.Text:=FloatToStr(tau0);
Form1.Edit15.Text:=FloatToStr(tau00);
Form1.Edit16.Text:=FloatToStr(dzetta);
Form1.Edit21.Text:=FloatToStr(b0);
Form1.Edit22.Text:=FloatToStr(ro00);
Form1.Edit17.Text:=FloatToStr(t_norm);
t:=0; t1:=0; ro:=1; ro1:=ro;i:=0;
AssignFile(temp,'temp.txt');
AssignFile(dat,path);
AssignFile(rof,'ro.txt');
AssignFile(Latf1,'Lattice.txt');
AssignFile(Latf,'CLattice.txt');
if not FileExists(ExtractFilePath(path)+'temp.txt') then
begin
    ReWrite(temp);
    H:=H0+Hex;
    while t<=t_max do
    begin
        if t1>=part*TSPL(H)*TSMN(H)/(TSPL(H)+TSMN(H)) then
        begin
            WriteLn(temp,t/t_norm,',',ro);
            Inc(i);
            t1:=0;
            ro1:=ro;
        end;
        H:=Hex+H0*ro1;
        dt:=0.1*Sqr(part)*TSPL(H)*TSMN(H)/(TSPL(H)+TSMN(H));
        Rungekut;
        t:=t+dt;
        t1:=t1+dt;
        Application.ProcessMessages;
    end;
    Steps:=i;
    CloseFile(temp);
end;
Reset(temp);
GetMem(pt,Sizeof(Extended)*Steps);

```

```

pts:=pt; t:=0;
while not EoF(temp) do
begin
  ReadLn(temp,t1);
  pt^:=(t1-t)*t_norm;
  longint(pt):=longint(pt)+sizeof(Extended);
  t:=t1;
end;
CloseFile(temp);
pt:=pts;
GetMem(pro,Sizeof(Extended)*Steps); pros:=pro;
if Form2.RadioButton1.Checked=True then
begin
  Ex_old:=0;
  for i:=1 to Steps do
  begin
    pro^:=0;
    longint(pro):=longint(pro)+sizeof(Extended);
  end;
  pro:=pros;
  ReWrite(Latf1); {начало создания новой решетки}
  N:=0;
  if Form1.ComboBox2.ItemIndex=2 then
    for Yi:=0 to L-1 do
    begin
      for Xi:=0 to L-1 do
      if not ((Yi<(L-1)/2)and(Xi<(L-1)/2-Yi) or
        (Yi>(L-1)/2)and(Xi>3*(L-1)/2-Yi)) then
      begin
        if Random<=p then begin N:=N+1;Lat[Xi,Yi]:=1 end else Lat[Xi,Yi]:=0;
        Write(Latf1,Lat[Xi,Yi],' ');
      end
      else
      begin
        Lat[Xi,Yi]:=0;
        Write(Latf1,Lat[Xi,Yi],' ');
      end;
      WriteLn(Latf1);
    end
  else
  for Yi:=0 to L-1 do
  begin
    for Xi:=0 to L-1 do
    begin
      if Random<p then begin N:=N+1;Lat[Xi,Yi]:=1 end else Lat[Xi,Yi]:=0;
      Write(Latf1,Lat[Xi,Yi],' ');
    end;
    WriteLn(Latf1);
  end;
  CloseFile(Latf1); {конец создания новой решетки}
  Form1.Edit18.Text:=IntToStr(N);
end

```

```

else
begin
  if CStep=0 then
  begin
    ReSet(dat);
    while not EoF(dat) do
    begin
      Read(dat,t);Read(dat,ro1);ReadLn(dat,ro);
      pro^:=ro*Ex_old;
      longint(pro):=longint(pro)+sizeof(Extended);
    end;
    CloseFile(dat);
    pro:=pros;
  end
  else
  begin
    Reset(rof);
    while not EoF(rof) do
    begin
      Read(rof,pro^);
      longint(pro):=longint(pro)+sizeof(Extended);
    end;
    CloseFile(rof);
    LongInt(pro):=LongInt(pros)+CStep*sizeof(Extended);
    LongInt(pt):=LongInt(pts)+CStep*sizeof(Extended);
    ReSet(Latf);
    for Yi:=0 to L-1 do
    begin
      for Xi:=0 to L-1 do
      begin
        Read(Latf,Lat[Xi,Yi]);
        if Lat[Xi,Yi]=2 then Lat[Xi,Yi]:=-1;
      end;
      ReadLn(Latf)
    end;
    CloseFile(Latf);
  end
end
end;

procedure Main;
var Flag1: Boolean;

procedure Change(dr:ShortInt;dN:Integer);
var Norm,Psum,Rnd:Double;
    Fg:Boolean;
begin
  Norm:=0;
  for Yi:=0 to L-1 do
  for Xi:=0 to L-1 do if Lat[Xi,Yi]=dr then Norm:=Norm+w[Xi,Yi];
  for i:=1 to dN do
  begin

```

```

Rnd:=Random; Psum:=0; Fg:=True;
for Yi:=0 to L-1 do
begin
  for Xi:=0 to L-1 do
  begin
    if Lat[Xi,Yi]=dr then Psum:=Psum+w[Xi,Yi]/Norm;
    if Psum>Rnd then
    begin
      Norm:=Norm-w[Xi,Yi];w[Xi,Yi]:=0; Fg:=False; Break
    end;
  end;
  if Fg=False then Break
end
end;
end;

procedure Safe;
begin
  SaveToIni(path,Ex_old+i2-1);
  ReWrite(rof);
  pro1:=pros;
  for i:=1 to Steps do
  begin
    Write(rof,' ',pro1^);
    longint(pro1):=longint(pro1)+sizeof(Extended);
  end;
  CloseFile(rof);
  ReWrite(Latf);
  for Yi:=0 to L-1 do
  begin
    for Xi:=0 to L-1 do
    if Lat[Xi,Yi]=-1 then Write(Latf,'2 ') else Write(Latf,Lat[Xi,Yi], ' ');
    WriteLn(Latf);
  end;
  CloseFile(Latf);
  Flag1:=False;
end;

begin
  Form1.Edit18.Text:=IntToStr(N);
  TurnOffTime:=StrToTime(Form1.Edit19.Text);
  for i2:=1 to Ex+Add_Ex do
  begin{*}
    if (Cstep=0) then
    begin
      Flag1:=True;
      ReSet(Latf1);
      for Yi:=0 to L-1 do
      begin
        for Xi:=0 to L-1 do Read(Latf1,Lat[Xi,Yi]);
        ReadLn(Latf1);
      end;
    end;
  end;
end;

```

```

CloseFile(Latf1);
end
else Flag1:=False;
for i1:=CStep+1 to Steps do
begin {**}
Form1.Label13.Caption:='Step '+IntToStr(i1)+' from '+IntToStr(Steps);
Form1.Label14.Caption:='Experiment '+IntToStr(i2)+' from '+IntToStr(Ex+Add_Ex);
dNpl:=0; dNmn:=0;
Hmin:=1E+20; Hmax:=0;
for Yi:=0 to L-1 do
for Xi:=0 to L-1 do
begin
if Lat[Xi,Yi]<>0 then
begin
Form1.StatusBar1.Panels.Items[2].text := 'Current step: '+TimeToStr(Time-Time1);
Application.ProcessMessages;
H:=0;
for Yj:=0 to L-1 do
for Xj:=0 to L-1 do if not((Xi=Xj)and(Yi=Yj)) then H:=H-field;
if Form1.ComboBox3.ItemIndex=1 then
if Form1.ComboBox2.ItemIndex<2 then H:=H-4*m*Lat[Xi,Yi]/exp(3*ln(d*L))-
4*m*Lat[Xi,Yi]/exp(3*ln(Sqrt(2)*d*L))
else
for q:=1 to 6 do H:=H-m*Lat[Xi,Yi]/exp(3*ln(Sqrt(Sqr(AddH2x[q])+Sqr(AddH2y[q]))));
H:=H+Hex;
if Hmax<abs(H) then Hmax:=abs(H);
if Hmin>abs(H) then Hmin:=abs(H);
Form1.Edit12.Text:=FloatToStr(Hmax);
Form1.Edit14.Text:=FloatToStr(Hmin);
if Lat[Xi,Yi]=1 then
begin
w[Xi,Yi]:=pt^TSPL(H);
if w[Xi,Yi]>1 then w[Xi,Yi]:=0;
dNpl:=dNpl+w[Xi,Yi];
end
else
begin
w[Xi,Yi]:=pt^TSMN(H);
if w[Xi,Yi]>1 then w[Xi,Yi]:=0;
dNmn:=dNmn+w[Xi,Yi];
end
end;
end;
if Random<Frac(dNpl) then dNpl:=dNpl+1;
if Random<Frac(dNmn) then dNmn:=dNmn+1;
Change(1,Trunc(dNpl));
Change(-1,Trunc(dNmn));
for Yi:=0 to L-1 do
for Xi:=0 to L-1 do if w[Xi,Yi]=0 then Lat[Xi,Yi]:=-Lat[Xi,Yi];
Npl:=0;
for Yi:=0 to L-1 do
for Xi:=0 to L-1 do if Lat[Xi,Yi]=1 then Npl:=Npl+1;

```

```

pro^:=pro^+2*Npl/N-1;
longint(pt):=longint(pt)+sizeof(Extended);
longint(pro):=longint(pro)+sizeof(Extended);
Form1.StatusBar1.Panels.Items[1].text := 'Step take: '+TimeToStr(Time-Time1);
Time1:=Time;
TurnOffTime:=StrToTime(Form1.Edit19.Text);
if Form1.CheckBox1.Checked=True then Safe
else
  if flag=False then Safe;
  if (flag=False)or((Time>TurnOffTime)and(Form1.CheckBox2.Checked=true)) then
    begin Safe; Break end;
end{**};
if (flag=False)or((Time>TurnOffTime)and(Form1.CheckBox2.Checked)) then Break;
CStep:=0;
pt:=pts;
pro:=pros;
t:=0;
ReSet(temp);
ReWrite(dat);
for i1:=1 to Steps do
begin
  Read(temp,t);ReadLn(temp,ro);
  ro1:=pro^(i2+Ex_old);
  If ro1<>0 then dif_ro:=(ro1-ro)/ro1 else dif_ro:=10E+10;
  WriteLn(dat,t,' ',ro,' ',ro1,' ',ro1-ro,' ',dif_ro);
  longint(pro):=longint(pro)+sizeof(Extended);
end;
pro:=pros;
CloseFile(dat);CloseFile(temp);
i1:=0;
SaveToIni(path,Ex_old+i2);
if Flag1=False then begin Erase(rof); Erase(Latf) end;
end;{*}
end;

procedure Completing;
begin
  FreeMem(pts,Sizeof(Extended)*Steps);
  FreeMem(pros,Sizeof(Extended)*Steps);
end;

procedure TForm1.FormCreate(Sender: TObject);
begin
  PostMessage(Form1.Handle,CM_BASE+300,0,0);
end;

procedure TForm1.RunClick(Sender: TObject);
begin
  if LabelErr.Visible=False then
  begin
    flag:=True;
    Form1.StatusBar1.Panels.Items[3].text := 'Preparation...';

```

```

Form1.Label13.Caption:=' Preparation...';
Form1.Panel1.Enabled:=False;
Form1.Panel2.Enabled:=False;
Form1.Run.Enabled:=False;
Form1.Next.Enabled:=False;
Form1.Exit.Enabled:=False;
Form1.Break.Enabled:=False;
Form1.PageControl1.ActivePage:=TabSheet3;
ReadParameters;
Randomize;
Preparation;
Form1.StatusBar1.Panels.Items[0].text := 'Start: '+TimeToStr(Time);
Time1:=Time;
Form1.Break.Enabled:=True;
Form1.StatusBar1.Panels.Items[3].text := 'Simulation...';
Main;
Completing;
if (Time>TurnOffTime)and(Form1.CheckBox2.Checked) then
begin
  Form1.Close; Form2.Close;
  Form1.Destroy; Form2.Destroy;
  ExitWindowsEx(EWX_SHUTDOWN, 0)
end;
Form1.Label13.Caption:="";
Form1.Label14.Caption:="";
Form1.Next.Enabled:=True;
Form1.Exit.Enabled:=True;
Form1.StatusBar1.Panels.Items[0].text := "";
Form1.StatusBar1.Panels.Items[1].text := "";
Form1.StatusBar1.Panels.Items[2].text := "";
Form1.StatusBar1.Panels.Items[3].text :='Ready';
end
end;

procedure TForm1.ExitClick(Sender: TObject);
begin
  Close
end;

procedure TForm1.InputEditChange1(Sender: TObject);
begin
  LabelErr.Visible:=False;
  SafeReadInt((Sender as TEdit).Text)
end;

procedure TForm1.InputEditChange2(Sender: TObject);
begin
  LabelErr.Visible:=False;
  SafeReadFloat((Sender as TEdit).Text)
end;

procedure TForm1.InputEditChange3(Sender: TObject);

```

```
begin
  LabelErr.Visible:=False;
  try
    TurnOffTime:=StrToTime((Sender as TEdit).Text)
  except
    on EConvertError do Form1.LabelErr.Visible:=True
  end
end;

procedure TForm1.NextClick(Sender: TObject);
begin
  Form2.ShowModal;
end;

procedure TForm1.BreakClick(Sender: TObject);
begin
  if MessageDlg('Are You Sure?', mtConfirmation,
    [mbOk, mbCancel], 0) = mrOk then
    flag := False;
end;

procedure TForm1.FormCloseQuery(Sender: TObject; var CanClose: Boolean);
begin
  if Form1.Exit.Enabled=False then CanClose := False;
end;

end.
```