

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОБМЕННО СВЯЗАННОЙ СИСТЕМЕ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ

*С. Н. Полулях, кандидат физико-математических наук, доцент*

### **Введение.**

Одним из основополагающих понятий современной теории магнитоупорядоченного состояния вещества является понятие спиновых волн. Наиболее полное математическое описание спиновых волн достигается в рамках квантовомеханической теории для трехмерной спиновой системы. В то же время, для качественного описания явления достаточно часто используется простая модель одномерной цепочки классических магнитных моментов, связанных обменным взаимодействием (см. например, [1, 2]). Основное преимущество такого подхода состоит в наличии простой векторной модели, позволяющей наглядно представить динамические процессы в системе.

В настоящей работе рассматривается компьютерная модель одномерной цепочки классических магнитных моментов. Предполагается, что каждый магнитный момент прецессирует в эффективном магнитном поле обменных взаимодействий. Математическая формулировка задачи сводится к записи выражения для эффективного магнитного поля и решению уравнений движения магнитного момента в этом поле. Эффективное поле обменных взаимодействий в системе прецессирующих магнитных моментов зависит от времени и для численного решения уравнений движения в этом случае предлагается метод микроповоротов. Путем варьирования начальных условий производится моделирование возбуждения спиновых волн и их взаимодействия как в однородной, так и в неоднородной цепочке магнитных моментов.

Отличие предлагаемого подхода от известных ранее состоит в том, что сравнительно простые математические методы используются лишь на этапе формулировки задачи для описания алгоритма вычисления временной зависимости проекций вектора магнитного момента на координатные оси. Проведение дальнейших расчетов с помощью компьютера позволяет избавиться как от громоздких промежуточных выкладок, так и от дополнительных ограничений, возникающих в процессе решения (например, таких, как разложения в бесконечные ряды с последующим использованием лишь нескольких первых членов ряда). Стандартный недостаток компьютерных методов "что заложишь — то получишь" в данном случае становится преимуществом, так как фактически закладываются только свойства системы. Результатом

является наличие или отсутствие тех или иных явлений в системе с заданными свойствами. Таким образом, предлагаемый подход не заменяет а существенно дополняет стандартные аналитические методы исследования.

Целью моделирования является качественный анализ влияния динамических процессов в электронной спиновой системе магнетика на сигналы ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Известно, что ЯМР в магнитоупорядоченных веществах предлагается в качестве одного из экспериментальных методов исследования динамики электронной спиновой системы [3]. В тоже время, при анализе результатов ЯМР эксперимента в магнетиках возникают проблемы, которые не всегда удастся решить в рамках существующих подходов [4 - 6].

### 1. Модель.

Для цепочки, состоящей из  $N$  магнитных моментов будем учитывать только гейзенберговские обменные взаимодействия между ближайшими соседями [1, 2]. С целью моделирования квазинсограниченной системы будем использовать циклические граничные условия [7], т.е. для  $N$ -го магнитного момента будем учитывать обменные взаимодействия с 1-м и  $(N-1)$ -м магнитными моментами. Выражение для полной энергии обменных взаимодействий представим в виде

$$E = -J \cdot \sum_{j=1}^{N-1} (\vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_{j+1}) - J \cdot \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_1, \quad (1)$$

где  $J$  — параметр обменных взаимодействий,  $\vec{\mu}_j$  — магнитный момент  $j$ -й частицы.

Эффективное магнитное поле, действующее на магнитный момент  $\vec{\mu}_j$  описывается выражением

$$\vec{B}_j^{\text{eff}} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{\mu}_j} = \begin{cases} J \cdot (\vec{\mu}_N + \vec{\mu}_2), & j = 1; \\ J \cdot (\vec{\mu}_{j-1} + \vec{\mu}_{j+1}), & 1 < j < N; \\ J \cdot (\vec{\mu}_{N-1} + \vec{\mu}_1), & j = N. \end{cases} \quad (2)$$

Будем полагать, что в основном состоянии магнитные моменты всех частиц параллельны друг другу и ориентированы перпендикулярно оси цепочки. Лабораторную систему координат (ЛСК) представляется удобным выбрать так, что ось  $Oy$  направлена вдоль оси цепочки а ось  $Oz$  — вдоль направления ориентации магнитных моментов в исходном состоянии.

Уравнения движения классического магнитного момента  $\vec{\mu}$  в магнитном поле  $\vec{B}$  представим в виде

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \cdot [\vec{\mu} \times \vec{B}] \quad (3)$$

где  $\gamma$  — гиромагнитное отношение. Наиболее простой вид решения уравнений (3) имеют в том случае, когда магнитное поле не зависит от времени и система координат выбрана так, что отлична от нуля только  $z$  компонента магнитного поля. В случае прецессии магнитных моментов в эффективном поле обменных взаимодействий величина и направление поля зависят от времени вследствие изменения пространственной ориентации магнитных моментов. В этом случае временной интервал  $t_0$ , соответствующий полному времени наблюдения над системой, можно разбить на достаточно малые, но конечные интервалы длительностью  $\Delta t$  так, что в течение интервала  $\Delta t$  магнитное поле можно считать не зависящим от времени. Если  $\vec{\mu}(t)$  — вектор магнитного момента в момент времени  $t$ , то в момент времени  $t' = t + \Delta t$  получаем

$$\vec{\mu}(t') = M_1^- \cdot M_2^- \cdot \begin{pmatrix} \cos \Omega & \sin \Omega & 0 \\ -\sin \Omega & \cos \Omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot M_2^+ \cdot M_1^+ \cdot \vec{\mu}(t), \quad (4)$$

где

$$M_1^- = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \pm \sin \varphi & 0 \\ \mp \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_2^\pm = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \mp \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \pm \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$\cos \varphi = B_x / B_\perp, \quad \sin \varphi = B_y / B_\perp, \quad \cos \theta = B_z / B, \quad \sin \theta = B_\perp / B,$$

$$B_\perp = \sqrt{B_x^2 + B_y^2}, \quad B = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}, \quad \Omega = \gamma \cdot B \cdot \Delta t.$$

Здесь  $B_{x,y,z}$  — компоненты вектора магнитного поля в ЛСК. При вычислении компонент вектора магнитного момента в (4) с помощью матриц поворота  $M_{1,2}^\pm$  осуществляется переход в систему координат, в которой отлична от нуля только  $z$  компонента поля. В этой системе координат производится поворот магнитного момента на угол  $\Omega$  вокруг оси Oz. Затем осуществляется переход в ЛСК. Фактически, выражения (4) обеспечивают решение уравнений (3) с помощью микроповоротов.

В результате непосредственных расчетов на ЭВМ получено, что метод микроповоротов обеспечивает более высокую устойчивость решений уравнений движения (3) по сравнению со стандартными численными методами решения систем дифференциальных уравнений [7]. В

частности, в рамках предлагаемого подхода, автоматически обеспечивается сохранение модуля магнитного момента. При этом следует отметить, что для вычисления компонент вектора  $\vec{\mu}(t)$  с помощью IBM PC AT при достаточно больших временах  $t$ , соответствующих более чем одному периоду прецессии, необходимо использовать переменные удвоенной точности.

Для компьютерного моделирования динамических свойств одномерной цепочки использовался следующий алгоритм. Система искусственно выводилась из основного состояния путем отклонения одного или нескольких магнитных моментов цепочки от оси  $Oz$  ЛСК. Затем, с помощью выражений (4), вычислялись "новые" значения проекций магнитных моментов всех частиц на ось ЛСК. Для вычисления эффективного магнитного поля (2) использовались "старые" значения проекций магнитных моментов. После последовательного перебора всех частиц "новые" компоненты использовались в качестве "старых", вновь вычислялись "новые" значения проекций магнитных моментов и т.д. Фактически, предлагаемый алгоритм подобен известному в компьютерной физике [6] методу молекулярной динамики.

С целью сохранения общности полученных результатов представляется удобным перейти к безразмерным единицам. Для этого компоненты вектора магнитного момента нормируем на величину модуля этого вектора  $|\vec{\mu}|$ . Компоненты вектора индукции магнитного поля нормируем на величину  $J \cdot \vec{\mu}$ . Безразмерное время будет отличаться от истинного на множитель  $\gamma \cdot J \cdot \vec{\mu}$ . Далее в работе под величинами  $\vec{\mu}$ ,  $\vec{B}$  и  $t$  понимаются соответствующие величины, выраженные в безразмерных единицах.

## 2. Результаты расчетов.

При проведении расчетов число частиц в цепочке  $N$  выбиралось равным степени двойки с целью возможности применения быстрого дискретного преобразования Фурье [7] к полученным результатам. Численное значение  $N = 128$  получено из соображений наиболее наглядного представления результатов при минимально возможном числе частиц. Длительность временного интервала  $\Delta t$  подобрана так, что дальнейшее уменьшение длительности не приводит к изменению результатов расчетов и при этом получено значение  $\Delta t = 2\pi \times 10^{-4}$ .

Рассмотрим ситуацию, когда все магнитные моменты цепочки одинаковы (однородная цепочка). Используем стандартную процедуру возбуждения волны, состоящую в отклонении первого магнитного момента от оси  $Oz$  на угол  $\alpha$  в плоскости  $xOz$  ЛСК. Затем предоставим

возможность всем магнитным моментам прецессировать в эффективных магнитных полях обменных взаимодействий (2). Временные зависимости проекций магнитных моментов частиц на ось  $Ox$  ЛСК при  $\alpha = \pi/270$  приведены на рис.1. Возле каждого графика указан порядковый номер магнитного момента в цепочке. Из данных, приведенных на рис.1 следует, что при рассмотренном возбуждении в цепочке магнитных моментов возникают колебания типа волнового пакета. Волновые пакеты распространяются симметрично в обоих направлениях от отклоненного магнитного момента. Волновой пакет, распространяющийся в отрицательном направлении оси  $Oy$ , виден на рис.1 для 36-го и 41-го магнитных моментов цепочки при больших временах. Дополнительно проведенные расчеты показали что, скорость распространения волнового пакета не зависит от угла  $\alpha$  при его изменении, по крайней мере, в пределах от нуля до  $2^\circ$ .

С целью возбуждения монохроматической волны использовалась следующая процедура. Первый магнитный момент отклонялся от оси  $Oz$  на угол  $\alpha$ . В течение времени  $\tau$  для первого магнитного момента вместо эффективного поля обменных взаимодействий (2) использовалось поле  $\vec{B} = (0 \ 0 \ B_1)$ . При этом первый магнитный момент прецессировал вокруг оси  $Oz$  ЛСК с частотой  $\omega$  (в выбранных выше безразмерных единицах частота  $\omega$  численно равна величине индукции магнитного поля  $B_1$ ). Все остальные магнитные моменты двигались под действием эффективного магнитного поля обменных взаимодействий (2). По истечению временного промежутка  $\tau$  поле  $B_1$  "выключалось" и первый магнитный момент также начинал двигаться под действием эффективных обменных полей. На рис.2 приведены временные зависимости  $x$  компонент магнитных моментов при  $\alpha = \pi/270$ ,  $B_1 = 1$  и  $\tau = 6.5 \pi$ .

Стандартная проблема теории спиновых волн — вопрос о дисперсионном соотношении. Для решения этого вопроса в рамках предлагаемой модели использовалась следующая процедура. Способом, описанным выше, в цепочке магнитных моментов возбуждалась плоская монохроматическая волна. В момент времени  $t_0$  фиксировались массивы  $\mu_x(y_j)$  и  $\mu_y(y_j)$  — массивы пространственного распределения компонент магнитных моментов частиц цепочки. Здесь  $y_j = j \cdot a$ , где  $a$  — расстояние между ближайшими частицами цепочки. Для пространственного распределения поперечных компонент магнитных моментов использовалось дискретное преобразование Фурье. Обнаружено, что результат преобразования Фурье зависит от

момента времени  $t_0$ , в который проводится преобразование. Чем дольше возбуждается волна, тем более четко выделяются спектральные максимумы в пространственном Фурье спектре.

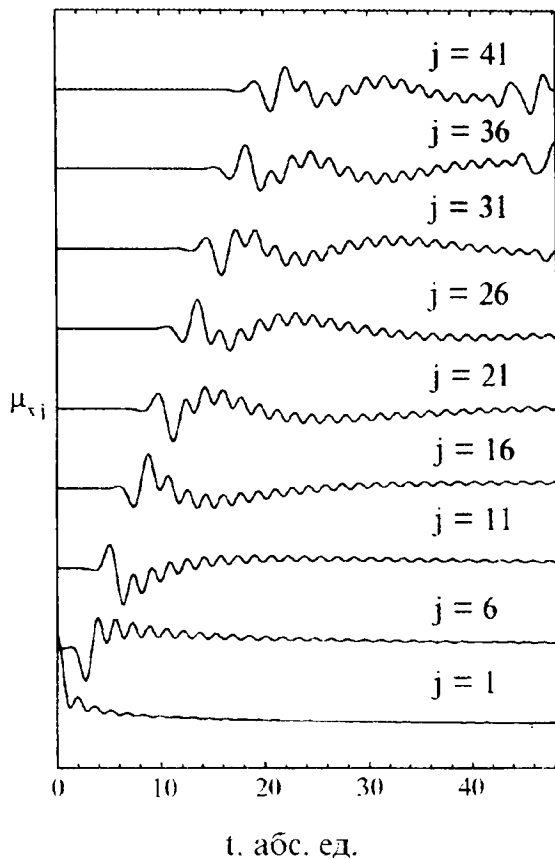


Рис. 1.

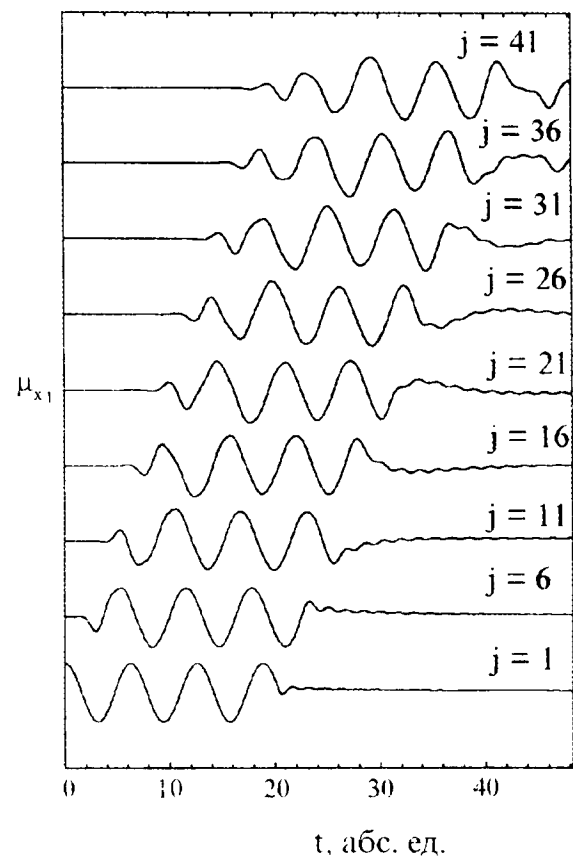


Рис. 2.

В результате использования преобразования Фурье для пространственного распределения магнитных моментов при различных значениях  $B_1$  получена зависимость модуля волнового вектора  $k = 2 \cdot \pi \cdot a / \lambda$  ( $\lambda$  — длина волны, выраженная в единицах) от частоты  $\omega$ . На рис.3 кружочками приведены расчетные значения  $k$ , соответствующие различным частотам  $\omega$  и  $t_0 = 15 \pi$ . При таком выборе  $t_0$  практически все магнитные моменты цепочки принимают участие в волновом движении, однако волны, распространяющиеся в противоположных направлениях от первого магнитного момента, друг с другом не перекрываются. Пунктирная линия на рис.3 — расчетная зависимость  $k = \omega^{1/2}$ . Как следует из данных, приведенных на рис.3, при малых  $k$  действительно имеет место квадратичная зависимость частоты от волнового вектора, что хорошо согласуется с известными теоретическими результатами [1, 2].

Верхняя граница для значений волнового вектора  $k$  на рис.3 обусловлена ограничениями дискретного преобразования Фурье.

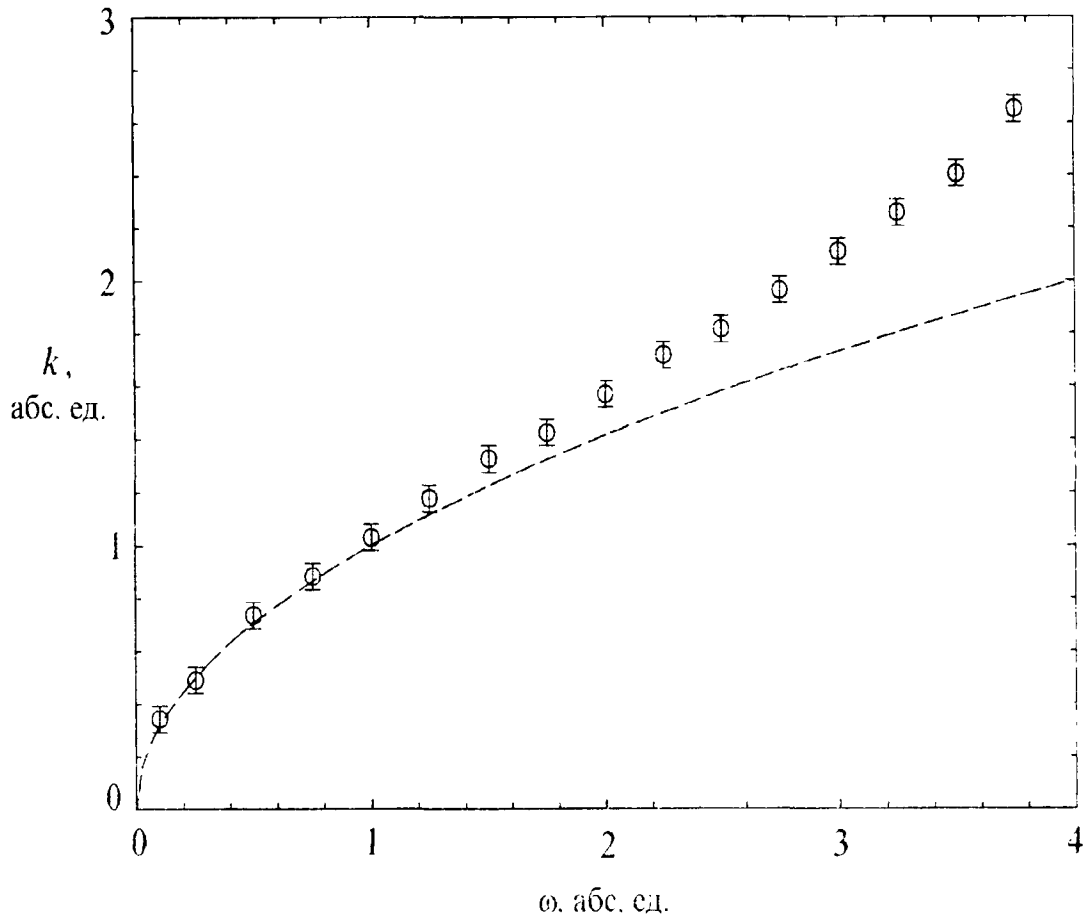


Рис.3.

В рамках предлагаемой модели представляется интересным рассмотреть ситуацию одновременного возбуждения в цепочке двух монохроматических волн. На рис. 4 приведены расчетные зависимости  $x$  компонент магнитных моментов от времени (сплошные линии) при отклонении первого магнитного момента от оси  $Oz$  на угол  $\alpha = \pi/270$  и последующей принудительной прецессии этого момента в поле  $B_1 = 1.7$  в течение времени  $\tau = 2.75 \pi$ . Одновременно, 41-й магнитный момент отклонялся на угол  $\alpha = -\pi/270$  и в течение того же времени  $\tau$  прецессировал в поле  $B_1 = 2.75$ . Пунктирные линии на рис.4 соответствуют

абсолютным значениям ( $\mu_j = \sqrt{\mu_x^2 + \mu_y^2}$ ) поперечных компонент магнитных моментов. Возле каждой зависимости указаны порядковые номера частиц в цепочке.

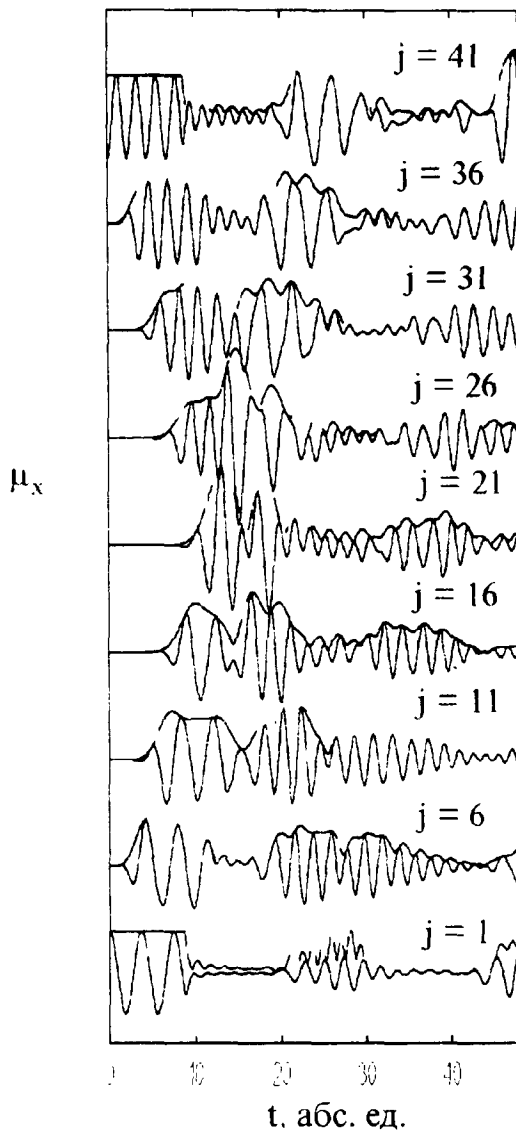


Рис. 4.

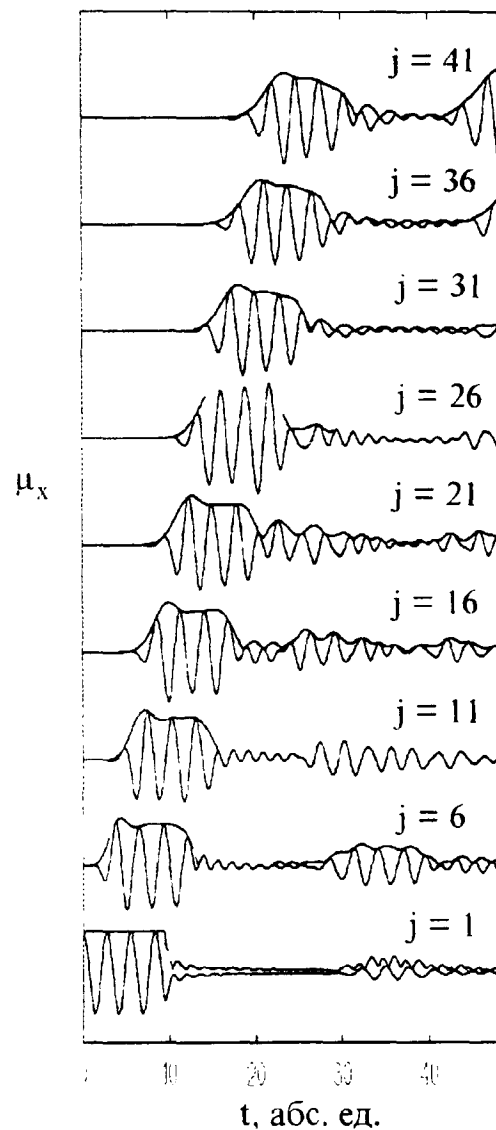


Рис. 5.

В результате расчетов, проведенных с использованием преобразования Фурье для временных зависимостей поперечных компонент магнитных моментов получено, что в однородной цепочке волны распространяются независимо друг от друга. В точках пространства, где одновременно сосуществуют две волны магнитные моменты участвуют одновременно в двух прецессионных



движениях. В результате имеют место колебания модуля поперечной проекции магнитного момента.

В качестве неоднородной цепочки предлагается рассмотреть цепочку магнитных моментов, содержащую примесь. Первый тип примеси — магнитный момент с гиромангнитным отношением  $\gamma$ , отличным от гиромангнитного отношения остальных магнитных моментов цепочки. На рис.5 приведены расчетные зависимости поперечных компонент магнитных моментов от времени (сплошные линии — проекции на ось  $Ox$  ЛСК, пунктирные — модули поперечных компонент), полученные при численном значении гиромангнитного отношения 31-й частицы, равном 0.75 от гиромангнитного отношения остальных частиц. Условия возбуждения волны:  $\alpha = \pi/270$ ,  $B_1 = 2.25$ ,  $\tau = 3\pi$ . Из сравнения результатов, приведенных рис.1 и рис.5, следует, что основное отличие неоднородной цепочки от однородной состоит в наличии волны, отраженной от магнитного момента, моделирующего примесь.

Второй рассмотренный тип примеси — примесь с сильной спин — орбитальной связью. С целью моделирования такой примеси для  $n$ -го магнитного момента цепочки, наряду с эффективным полем обменных взаимодействий, учитывалось дополнительное эффективное поле  $B_2 = K_1 \cdot \mu_n$ . Фактически, это дополнительное поле является эффективным полем магнитной кристаллографической анизотропии для одноосных кристаллов [9]. В этом случае также обнаружена волна, отраженная от примеси. Однако амплитуда этой волны становится заметной при численных значениях константы анизотропии  $K_1$ , сравнимых с величиной параметра обменных взаимодействий  $J$ . Однако, столь сильная анизотропия вряд ли может рассматриваться как физически реальная.

### 3. Обсуждение полученных результатов.

Полученные в рамках предлагаемой численной модели расчетные результаты в принципе согласуются с известными результатами, полученными при помощи стандартных аналитических методов [1, 2, 9]. Особенности, связанные с зависимостью типа волны (волновые пакеты и цуги монохроматических волн) от условий возбуждения (рис. 1, 2) а также расплывание волнового цуга (рис. 2, 4, 5) в спин — волновой теории традиционно не обсуждаются, однако обнаруженные особенности соответствуют общим положениям теории колебаний и волн.

Интересно отметить следующее. В рамках предлагаемой модели максимальное значение эффективного обменного поля (2) достигается при параллельной ориентации магнитных моментов, ближайших к заданному. Численное значение величины этого поля, в выбранных безразмерных единицах, равно 2, что соответствует частоте  $\omega = 2$ . В тоже время, в результате проведенных расчетов обнаружены монохроматические волновые цуги с  $\omega > 2$  (рис. 3 — 5). При этом оказалось, что увеличения поля  $B_1$  (или, что тоже самое, частоты  $\omega$ ) приводит к ухудшению условий возбуждения волны и при  $\omega > 10$  волновой процесс в цепочке практически не возбуждается. Таким образом, вопрос о верхней границе спин — волнового спектра в одномерной цепочке магнитных требует дальнейшего уточнения.

Полученные расчетные результаты представляется интересным обсудить с точки зрения влияния электронной спиновой динамики на магнитный резонанс ядерной спиновой системы магнетика. Известно, что основная особенность ЯМР в магнетиках состоит в наличии сильных магнитных сверхтонких полей на ядрах [3] и величина этого поля пропорциональна электронной намагниченности. Как правило, характерные частоты волновых процессов в электронной спиновой системе на несколько порядков выше частоты ЯМР и такие процессы не должны оказывать заметного влияния на магнитный резонанс ядер. В тоже время, из данных, приведенных на рис. 5, 6 следует, что при определенных условиях могут наблюдаться колебания поперечных компонент электронных магнитных моментов на частотах, ниже резонансной. В силу сохранения модуля вектора магнитного момента, при этом также наблюдаются колебания продольной компоненты магнитного момента. Кроме того, Фурье анализ временных зависимостей поперечных компонент магнитных моментов в случае возбуждения волны путем простого отклонения одного магнитного момента от положения равновесия показывает, что в этом случае реализуется широкий непрерывный частотный спектр с отличной от нуля спектральной плотностью на нулевой частоте.

Очевидно, что ситуация, когда магнитный момент может принимать участие в двух и более колебаниях и число колебаний является флуктуирующей величиной характерно для тепловых магнонов. При этом, в силу магнитных сверхтонких взаимодействий, будут флуктуировать локальные продольное и поперечное магнитные поля на ядрах. Флуктуации локальных магнитных полей на ядрах приводят к релаксации ядерной намагниченности. Детальное обсуждение влияния динамических процессов в обменно-связанной электронной спиновой системе образца на ядерную магнитную релаксацию в магнетиках выходит за рамки предлагаемой работы, однако следует

отметить, что увеличение скорости как продольной, так и поперечной ядерной магнитной релаксации с увеличением температуры наблюдается экспериментально (см. например [4]). Кроме того, низкочастотные колебания намагниченности могут быть ответственны за экспериментально наблюдаемый методом ЯМР [4 - 6] статический и динамический ориентационный разброс электронной намагниченности в кристаллах.

#### **Заключение.**

Таким образом, в рамках предложенной численной модели одномерной цепочки обменно-связанных магнитных моментов получены основные свойства такой цепочки непосредственно из "первопричин". Фактически все ограничения модели закладываются на этапе постановке задачи и результаты численного эксперимента могут быть использованы для непосредственной проверки результатов, полученных аналитическими методами. К преимуществам предлагаемого подхода можно отнести отсутствие громоздких промежуточных выкладок, возможность относительно простой реализации описанного алгоритма при помощи стандартных методов программирования. Кроме того, численное исследование свойств системы требует тщательной и четкой формулировки физической постановки задачи.

Предполагается дальнейшее развитие предлагаемого подхода на системы большей размерности и также для моделирования влияния динамических процессов в обменно-связанной электронной спиновой системе образца на процессы ядерной релаксации в магнитоупорядоченных веществах.

В заключении автор выражает благодарность профессору Бержанскому В. Н. за полезные обсуждения результатов работы.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Гл.16. М.: Наука, 1978.
2. Маделунг О. Теория твердого тела. Гл.6. М.: Наука, 1980.
3. Куркин М. И., Туров Е. А. ЯМР в магнитоупорядоченных веществах и его применения. М.: Наука, 1990.
4. Бержанский В. Н., Полулях С. Н. ФТТ. 31 (1989) 256.
5. Abelyashev G. N., Berzhansky V. N., Polulyakh S. N., Sergeev N. A. Multiple structure and relaxation of quadrupolar spin echoes in magnetic solids. In Abstr. of "The European Conference Physics of Magnetism 96". Poznan, 1996, P. 113.
6. Abelyashev G. N., Polulyakh S. N., Berzhanskij V. N., Sergeev N. A. JMMM. 147 (1995) 305.

7. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т.1. М.: МИР, 1990.
8. Дьяконов В. П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для персональных ЭВМ. Гл. 5. М.: Наука, 1987.
9. Гуревич А. Г. Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках. М.: Наука, 1975.