

## اثر برهم‌کنش تبادلی و ناهمسانگردی یونی منفرد بر حلقه پسماند آلیاژهای

### سه‌تایی فری‌مغناطیس $AB_xC_{1-x}$ با ساختار آمورف

حمزه نخعی مطلق، قاسم رضایی\*

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

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

#### چکیده

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

**کلیدواژه‌گان:** آلیاژهای سه‌تایی، فری‌مغناطیس، شبیه‌سازی مونت کارلو، مدل RKKY، برهم‌کنش تبادلی، ناهمسانگردی یونی منفرد، حلقه پسماند

#### مقدمه

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

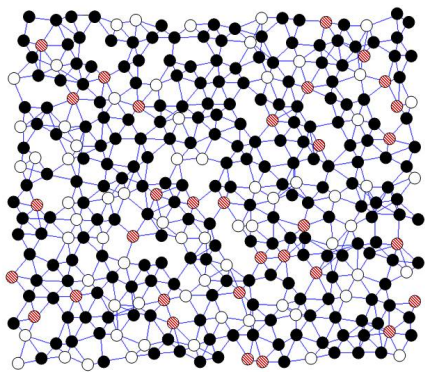
در سال‌های اخیر مطالعات تجربی و نظری بسیاری روی آلیاژهای سه‌تایی فری‌مغناطیس با ترکیب  $AB_xC_{1-x}$  به‌واسطه کاربرد بی‌شمارشان در حوزه مواد مغناطیسی انجام شده‌است. خصوصیات مغناطیسی این آلیاژها نظیر گذار فاز، حلقه پسماند و پذیرفتاری مغناطیسی به‌وسیله رهیافت‌های نظری مختلفی از قبیل نظریه میدان مؤثر [1-2]،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

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

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

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

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



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

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

## مدل

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

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

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

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

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

### شبیه‌سازی مونت کارلو

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

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

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

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

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

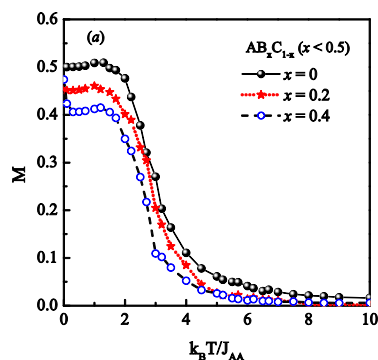
$$F(x) = \frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x^4}$$

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

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

### الف: اثر غلظت بر رفتار حرارتی مغناطش

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



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

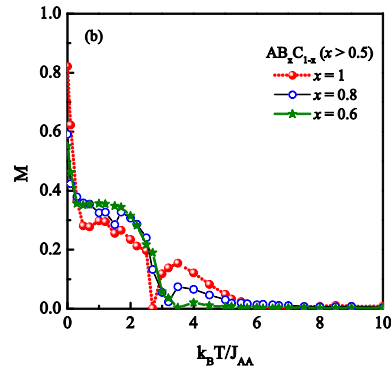
$$M = \frac{1}{N_{tot}} \sum_i S_i \quad 3$$

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

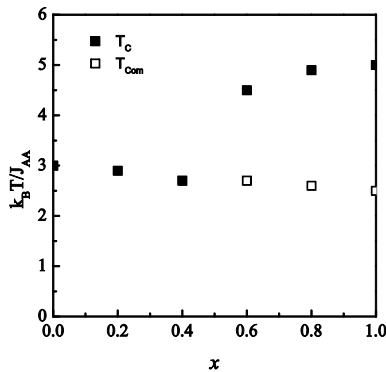
### نتایج و بحث

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

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



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



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

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

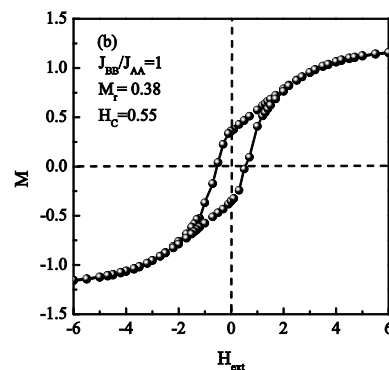
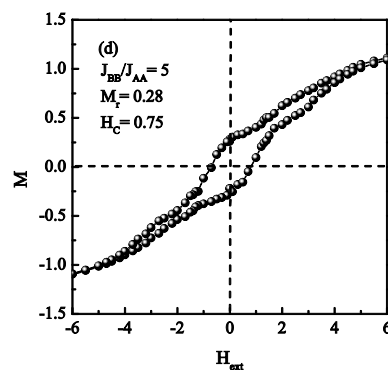
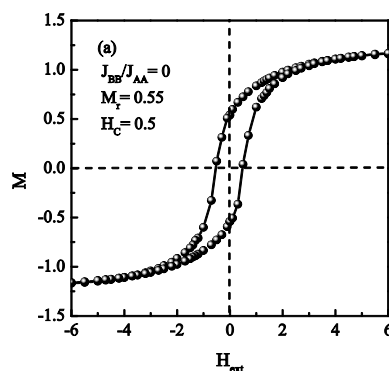
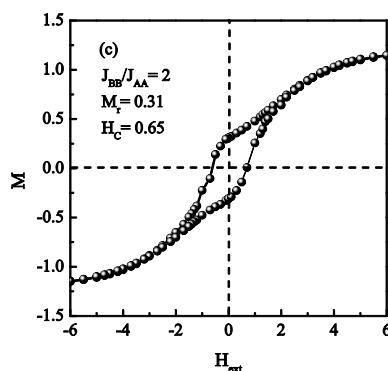
همچنین مشاهده می‌شود که به‌طور معمول در این بازه، آلیاژهای سه‌تایی فری مغناطیس  $AB_x C_{1-x}$  با ساختار آمورف، رفتار مغناطیسی مشابه‌ای مانند ساختارهای فرومغناطیسی از خود بروز می‌دهند. به عبارتی در این بازه از غلظت که درصد یون‌های مغناطیسی B در مقایسه با یون‌های A و C کمتر است، اثر خستگی سازی تبدیلی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

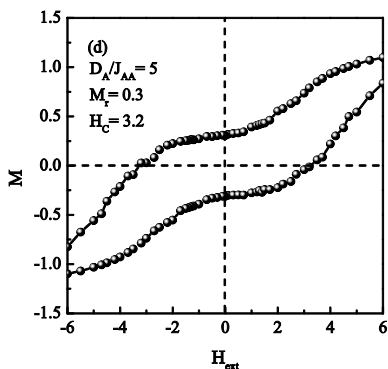
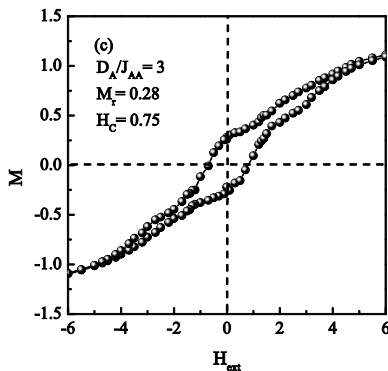
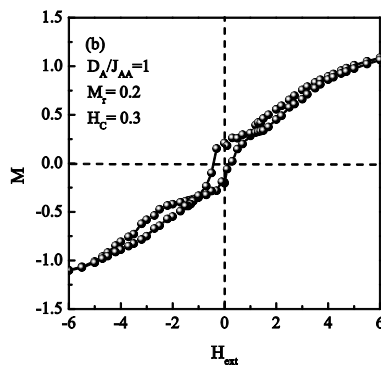
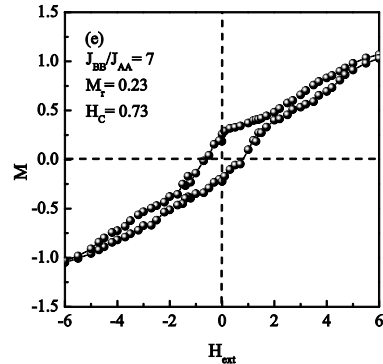
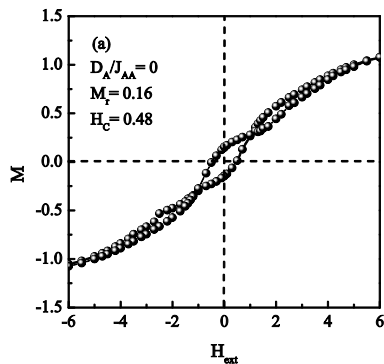
بین اسپین های C برابر با  $J_{CC}/J_{AA} = 3$  باشد و پارامتر تبدیلی  $J_{BB}/J_{AA}$  تغییر کند. پارامترهای ناهمسانگردی یونی منفرد  $D_A/J_{AA} = 3$ ،  $D_B/J_{AA} = 0.5$  و  $D_C/J_{AA} = 1$  در نظر گرفته شده اند. با توجه به نتایج، با افزایش برهم کنش تبدیلی  $J_{BB}/J_{AA}$  از مقدار صفر تا 7، منحنی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

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

### (ب) اثر برهم کنش تبدیلی بر حلقه پسماند

شکل های 4-a تا 4-e اثر برهم کنش تبدیلی،  $J_{BB}/J_{AA}$ ، روی منحنی پسماند (نمودار M-H) یک سه تایی فری مغناطیسی  $AB_{0.8}C_{0.2}$  با ساختار آمورف را نشان می دهند. شبیه سازی ها در زیر دمای بحرانی جبران و به ازای  $k_B T/J_{AA} = 2$  انجام شده اند. در این شبیه سازی فرض کرده ایم که پارامتر برهم کنش تبدیلی





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

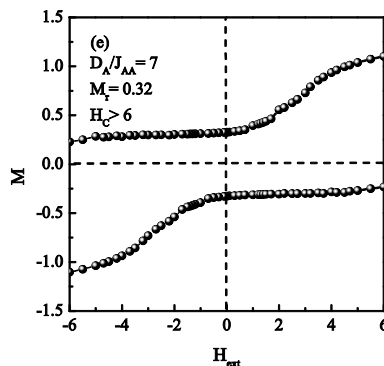
به‌عبارتی به‌واسطه اثر خنثی‌سازی تبدالی، منحنی پسماند ماده از یک رفتار فری‌مغناطیسی به منحنی‌های نابهنجار تغییر شکل می‌دهد. به‌نحوی که در مقادیر 5 و 7، به‌ترتیب در شکل‌های 4-d و 4-e حلقه‌های پسماند پلکانی تشکیل شده است. نتایج همچنین نشان می‌دهند که تغییرات میدان وادرندهگی ( $H_C$ ) و همچنین مغناطش باقیمانده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

ج) اثر ناهمسانگردی یونی بر حلقه پسماند

دماهای پایین به دست آمده است [21]. علاوه بر این، منحنی های پسماند سه حلقه ای در دو لایه ای های مغناطیسی با برهم کنش فرومغناطیس-پادفرومغناطیس، که با استفاده از روش تابع گرین مطالعه شده است، به دست آمده اند [22]. چنین منحنی هایی در نتایج تجربی نیز گزارش شده است [23-24].

نتایج در شکل های 5-c و 5-d نشان می دهند که به ازای  $D_A/J_{AA} \geq 3$ ، حلقه های پسماند پلکانی ایجاد شده است، که در آنها با افزایش  $D_A/J_{AA}$  میدان وادارندگی  $H_C$  افزایش یافته است. به نحوی که در  $D_A/J_{AA} = 7$  میدان وادارندگی بزرگتر از 6 به دست آمده است. همچنین نتایج شبیه سازی نشان می دهند که در ناهمسانگردی های  $D_A/J_{AA} = 0$  و  $D_A/J_{AA} = 1$  مغناطش باقیمانده در حالت میدان معکوس منفی شده است. این به معنای معکوس شدن اسپین های سیستم در میدان مغناطیسی صفر است. چنین اثری در چند لایه ای های مغناطیسی Co/Mn/Co رشد داده شده روی بستر GaAs [23] و چند لایه ای Co/Pt/Gd/Pt [24] مشاهده شده است. که در آنها برهم کنش بین لایه ها به صورت پادفرومغناطیسی گزارش شده است. تجزیه و تحلیل عمیق تر نتایج شبیه سازی نشان می دهد که پدیده مغناطش باقیمانده منفی در مواد فرومغناطیس آیزینگ اتفاق نمی افتد. نتایج همچنین نشان می دهند که با افزایش ناهمسانگردی یونی به ازای  $D_A/J_{AA} \geq 3$  پدیده مغناطش باقیمانده منفی از بین رفته است.

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



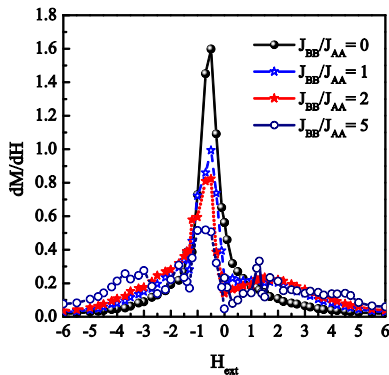
شکل 5. اثر ناهمسانگردی یونی منفرد  $D_A/J_{AA}$  بر حلقه پسماند یک سه تایی فری مغناطیسی  $AB_{0.8}C_{0.2}$  با ساختار آمورف در بازه میدان اعمال شده  $-6 \leq H_{ext} \leq 6$  به ازای  $k_B T/J_{AA} = 2$ ،  $D_C/J_{AA} = 1$  و  $D_B/J_{AA} = 0/5$ ،  $J_{BB}/J_{AA} = 5$ ،  $J_{CC}/J_{AA} = 3$ ،

در شکل 5 اثر ناهمسانگردی یونی منفرد  $D_A/J_{AA}$  روی حلقه پسماند یک آلیاژ سه تایی فری مغناطیس آمورف با ترکیب  $AB_{0.8}C_{0.2}$  نشان داده شده است. شبیه سازی نمونه ها در  $k_B T_c/J_{AA} = 2$  و در بازه میدان مغناطیسی اعمال شده  $-6 \leq H_{ext} \leq 6$  انجام شده است. در این شبیه سازی پارامترهای برهم کنش تبدیلی و ناهمسانگردی یونی منفرد عبارتند از:  $D_B/J_{AA} = 0/5$ ،  $J_{BB}/J_{AA} = 5$ ،  $J_{CC}/J_{AA} = 3$  و  $D_C/J_{AA} = 1$ . با توجه به شکل های 5-a و 5-b می بینیم که به ازای  $D_A/J_{AA} = 0$  و  $D_A/J_{AA} = 1$  به جای یک تک حلقه در منحنی پسماند، منحنی های سه حلقه ای ایجاد شده است. چنین پدیده ای می تواند ناشی از غلبه اثر خنثی سازی تبدیلی در میدان های ضعیف باشد که در آن رفتار مغناطش ماده در نتیجه رقابت بین برهم کنش های فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی به طور کامل با رفتار یک ماده فرومغناطیس معمولی در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی، متفاوت می شود. نتایج شبیه سازی مونت کارلوی مشابه ای برای نانوسیم های هسته-پوسته با اسپین 1 در ناهمسانگردی یونی صفر و در محدوده

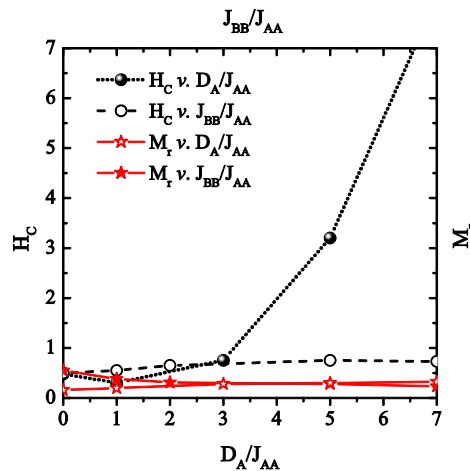


خستگی‌سازی تبدالی نابهنجاری قوی‌تری را با تغییر ناهمسانگردی یونی منفرد ایجاد کرده‌است.

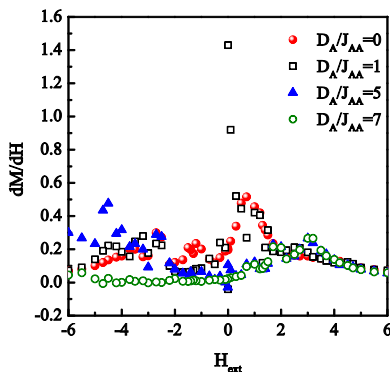
تأثیر قابل توجهی بر قدر مطلق مغناطش باقیمانده،  $|M_F|$  ندارد.



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



شکل 6. نمودار تغییرات  $M_F$  و میدان وادارندگی،  $H_C$  بر حسب  $D_A/J_{AA}$  و  $J_{BB}/J_{AA}$ .



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

### نتیجه‌گیری

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

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

- [7] G. Mert, Green's function study of a three-sublattice mixed-spin Heisenberg ferromagnetic and ferrimagnetic system, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **363** (2014) 224-231.
- [8] M. Zukovic, A. Bobak, Critical and compensation phenomena in a mixed-spin ternary alloy: a Monte Carlo study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **322** (2010) 2868-2873.
- [9] G.M. Buendia, J.E. Villarroel, Compensation temperatures of mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloys, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **310** (2007) e495-e497.
- [10] J. Dely, A. Bobak and D. Horvath, Mean-Field and Monte Carlo Study of a Mixed Ferro-Ferrimagnetic Ternary Alloy, *Acta Physica Polonica A* **113** (2008) 461-464.
- [11] E. Vatansever, Y. Yüksel, Dynamic phenomena in magnetic ternary alloys, *Journal of Alloys and Compounds* **689** (2016) 446-450.
- [12] S. Tsuji, T. Kasama, T. Idogaki, Decoration-iteration transformation and Monte Carlo simulation for mixed ferrimagnetic ternary alloy, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **310** (2007) e471-e473.
- [13] H. Kawamura, A Simplified Model of Phase Transition in Amorphous Antiferromagnets. II: Effect of the Magnetic Field, *progress of Theoretical physics* **70** (1983) 1197-1206.
- [14] L. Wang, J. Ding, H. Z. Kong, Y. Li, Y.P. Feng, Monte Carlo simulation of a cluster system with strong interaction and random anisotropy, *Physical Review B* **64** (2001) 214410.
- [15] H. Nakhaei Motlagh, G. Rezaei, Magnetic properties of ferro-ferrimagnetic ternary alloys with  $A_y(B_xC_{1-x})_{1-y}$  amorphous structures: Effects of concentration, temperature and magnetic field, *Journal of Alloys and compounds* **711** (2017) 677-685.
- [16] M.A. Ruderman, C. Kittel, Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons, *Physical Review* **96** (1954) 99.
- [17] T. Kasuya, A theory of Metallic Ferro and Antiferromagnetism on Zener's Model, *Progress of Theoretical Physics* **16** (1956) 45-57.
- [18] K. Yosida, Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys, *Physical Review* **106** (1957) 893.
- نشان می دهند که با تغییر پارامترهای برهم کنش تبدالی و ناهمسانگردی یونی، حلقه پسماند تغییر شکل می دهد. به نحوی که در برخی موارد منحنی های پلکانی و حلقه های سه تایی تشکیل شده است. چنین رفتار نابهنجاری در منحنی های پسماند یک ساختار سه تایی فری مغناطیس می تواند ناشی از رقابت بین برهم کنش های تبدالی فری مغناطیسی و پادفری مغناطیسی در میدان های ضعیف باشد. به عبارتی خشی سازی تبدالی در میدان های ضعیف یکی از مهمترین عوامل ایجاد منحنی های پلکانی و حلقه های سه تایی شناخته شده است. همچنین رفتار حرارتی مغناطش در غلظت های مختلف B نیز بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که به ازای برخی از غلظت ها، دمای بحرانی جبران در زیر دمای کوری پدیدار شده است.
- مرجع ها
- [1] H. Hu, Z. Xin, W. Liu, Magnetic properties of the mixed ferro-ferrimagnets composed of Prussian blue analogs with  $(A_xB_{1-x})_yC$ , *Physics Letters A* **357** (2006) 388-392.
- [2] A. Bobak, O.F. Abubrig, D. Horvath, Magnetic properties of a mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy, *Physica A* **312** (2002) 187-207.
- [3] A. Bobak, F.O. Abubrig, T. Balcerzak, Phase diagrams of the mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272-276** (2004) 989-990.
- [4] J. Dely, A. Bobak, Magnetic properties of the ternary alloy with a structure of Prussian blue analogs, *Physica B* **388** (2007) 49-58.
- [5] J. Dely, A. Bobak, Phase diagrams of the ternary alloy with a single-ion anisotropy in the mean-field approximation, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **305** (2006) 464-466.
- [6] J. Dely, A. Bobak, M. Zukovi, Critical temperature of a mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy, *Journal of Physics: Conference Series* **200** (2010) 022005.

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