

دراسة تأثير الحقل المغناطيسي الخارجي على الخواص المغناطيسية للمغناطيس الحديدي باستخدام خوارزمية مونت كارلو

د. م. مجد الدين العلي *

م. محمد الشمالي **

(تاريخ الإيداع 2022/7/26 . قُبل للنشر في 2022/11/6)

□ ملخص □

يُظهر الحديد والنيكل والكوبالت وبعض الأتربة النادرة (الجادولينيوم والديسبروسيوم) سلوكًا مغناطيسيًا فريدًا يسمى المغناطيسية الحديدية (الحديد أو "الحديدك" هو المثال الأكثر شيوعًا للمواد عالية النفاذية). يقوم البحث على تنفيذ نموذج Ising للمغناطيسية باستخدام خوارزمية متروبوليس لمحاكاة الطبيعة الاحتمالية للمغناطيس الحديدي ونهجه في التوازن. كذلك دراسة اعتماد المغنطة على درجة الحرارة وانتقال الطور عند درجة الحرارة الحرجة. **كلمات مفتاحية:** المغناطيسية الحديدية، نموذج Ising، وطرائق حساب مونت كارلو، خوارزمية متروبوليس.

* أستاذ مساعد في قسم الهندسة الالكترونية والاتصالات – كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية – جامعة البعث.
** طالب دكتوراه في قسم الهندسة الالكترونية و الاتصالات – كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية – جامعة البعث.

Studying the effect of the external magnetic field on the magnetic properties of ferromagnets using Monte Carlo algorithm

Dr.Eng. Majdeldden Alali*
Eng. Mohammad Alshimali**

(Received 26/7/ 2022 . Accepted 6/11/ 2022)

□ ABSTRACT

Iron, nickel, cobalt and some of the rare earths (gadolinium, dysprosium) exhibit a unique magnetic behavior which is called ferromagnetism (iron or 'ferric' is the most common example of a ferromagnetic material).

The research is based on the implementation of the Ising model of magnetism using the Metropolis algorithm to simulate the probabilistic nature of ferromagnet and its approach to equilibrium. As well as studying the dependence of magnetization on temperature and phase transition at the critical temperature.

Keywords: ferromagnetism, Ising model, Monte Carlo calculation methods, Metropolis algorithm.

*Assistant Professor in the Department of Electronic and Communications Engineering - Faculty of Mechanical and Electrical Engineering - Al-Baath University.

**PhD student in the Department of Electronic and Communications Engineering - Faculty of Mechanical and Electrical Engineering - Al-Baath University.

1- مقدمة:

قمنا في هذا البحث بدراسة المغناطيسية الحديدية باستخدام نموذج Ising وطرائق حساب مونت كارلو باستخدام خوارزمية Metropolis. في عام 2017 تمت دراسة الخصائص المغناطيسية والمغناطيسية الحرارية لبنى DyNi4Si النانوية باستخدام طرائق مونت كارلو وبيئت أن تحسين الخصائص المغناطيسية والمغناطيسية الحرارية ينتج عن طريق تقليل كل من البعد والحجم [1]، كما تمت دراسة مخططات الطور والخصائص المغناطيسية لطبقة واحدة من الجرافين النانوية وبيئت قدرة الجرافين النانوي أن يظهر طور عالي النفاذية محصور بين الطور المضاد للمغناطيسية والنفاذية العالية [2]، تم أيضا دراسة السلوك المغناطيسي والديناميكي الحراري لنفاذية الجزر النانوية حيث بيئت تأثير الحقول البلورية، وصلات التبادل والحقل المغناطيسي الخارجي على السلوك المغناطيسي والديناميكي الحراري للنظام [3]، في عام 2020 استخدمت محاكاة مونت كارلو لدراسة هضاب المغنطة والخصائص الديناميكية الحرارية لبنى الجرافين النانوي مع دوران مختلط $-3/2$ و $-5/2$ في حقل مغناطيسي طولي وبيئت النتائج أن الطاقة الداخلية للنظام يمكن أن تخفض بانقاص تباينات الخواص وزيادة اقتران التبادل بين الطبقات بالإضافة للحقل المغناطيسي الطولي [4].

المغناطيسية هي ظاهرة كمومية بطبيعتها. حيث يعتبر دوران الإلكترون والعزم المغناطيسي المصاحب له عاملين مهمين في نظرية المغناطيسية. تنشأ المغناطيسية الحديدية عندما تصطف الكثير من هذه الدورانات في نفس الاتجاه لتشكل عزما مغناطيسيا واضحا [5].

محاذاة دوران الإلكترون يحكمها عاملين متنافسين: تقليل الطاقة وتحقيق الحد الأعظمي من الانتروبي [6]. تلعب درجة الحرارة دورا رئيسيا في توازن الاثنين -تحت درجة حرارة معينة - يكون للمغناطيس الحديدية عزم مغناطيسي واضح، بغض النظر عن الحقل الخارجي المطبق. ومع ذلك، فوق درجة الحرارة الحرجة هذه، تفقد المادة مغناطيسيتها. هذا مثال على انتقال الطور [7].

نود استخدام نموذج Ising لدراسة كيفية ظهور هذه الأنظمة، والدور الذي تلعبه الاحتمالية والعشوائية، وكيف يتأثر النظام بحقل مغناطيسي خارجي، والأهم من ذلك، تأثير درجة الحرارة على مثل هذا النظام ومغناطيسيته.

2- هدف البحث:

النمذجة والمحاكاة ضرورية لعلم المواد النانوية، فالتجارب والأجهزة مكلفة وخطر الفشل كبير ولا يمكن تقليله، كما أن التطبيقات التكنولوجية الهامة للمواد النانوية تكمن في خصائصها المغناطيسية الغير متوقعة. وبالتالي تحديد هذه الخواص باستخدام خوارزمية مونت كارلو يقلل الضياعات (فقد المعلومات) في التجارب المخبرية الناتج عن التجهيزات المستخدمة، العامل البشري، جودة تحضير العينة المدروسة، مما يساهم في تطوير التطبيقات التكنولوجية المعتمدة على المواد النانوية المدروسة.

الهدف من البحث دراسة المغنطة كتابع لعدد خطوات خوارزمية مونت كارلو، كذلك دراسة تأثير تطبيق حقل خارجي على المغنطة كتابع لدرجة الحرارة.

3- مواد وطرائق البحث:

يعتمد هذا البحث على المنهج العلمي التحليلي، ويقوم بتطبيق نموذج Ising وطرائق حساب مونت كارلو على شبكة مغناطيسية ثنائية الأبعاد. أما أدوات البحث هي أدوات برمجية حيث تم استخدام لغة البرمجة Python.

3-1- نموذج Ising:

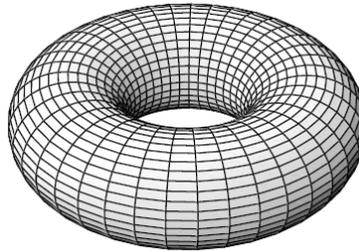
يصف نموذج Ising ثنائي الأبعاد المغناطيس الحديدي على أنه شبكة مربعة $N \times N$ ، حيث يمثل كل عنصر إلكترونًا مع دوران معين. سنفترض أن الدوران يمكن أن يكون فقط "للأعلى" أو "للأسفل". إذن، دوران العنصر i ، $S_i = \pm 1$.

يتم إعطاء طاقة ترتيب معين من خلال:

$$E = -J \sum_{i,j} S_i S_j + B \sum_i S_i \dots \dots \dots (1)$$

هنا، يكون المجموع الأول للجيران الأربعة الأقرب للإلكترون، والثاني لجميع المواقع في الشبكة [7]. يُعرف J باسم ثابت التبادل وبالنسبة للمغناطيس الحديدي، $J > 0$. B هو الحقل المغناطيسي الخارجي المطبق. من المصطلح الأول في المعادلة (1)، يمكننا أن نرى أنه من المفضل بقوة للإلكترونات المجاورة أن تدور في نفس الاتجاه.

بالنسبة لهذا البرنامج، سنستخدم شروط الحدود الدورية. لذلك، فإن النقاط الحدودية التي ليس لها أربعة جيران مباشرين "تتفاعل" مع النقاط الموجودة على الطرف المقابل الهندسي للشبكة. بهذه الطريقة، يمكننا تمثيل الشبكة ثنائية الأبعاد على شكل طارة ثلاثية الأبعاد كما في الشكل (1).



الشكل (1): رسم توضيحي لحلقة ثلاثية الأبعاد تمثل شبكة ثنائية الأبعاد بشروط الحدود الدورية.

جنبًا إلى جنب مع اعتبارات الطاقة، علينا أيضًا التفكير في إنتروبي النظام (هناك العديد من الطرق التي يمكن أن يكون النظام بها "غير مرتب"). نجد أنه في درجات الحرارة المنخفضة، يُفضل التشكيل المنتظم، بينما يفضل التشكيل الغير منتظم عند درجات حرارة عالية. بالنسبة للشبكة المربعة اللانهائية، فقد تبين أن انتقال الطور يحدث عند $T \approx 0.44 \text{ k_B} / J$. [8]. بالنسبة لشبكة مربعة محدودة، ستكون حدة هذه النقطة الحرجة غير واضحة.

وفقًا للميكانيكا الإحصائية، يتناسب احتمال تشكيل معين مع عامل بولتزمان $\exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right)$ [8] حيث:

k_B : ثابت بولتزمان.

T : درجة الحرارة المطلقة.

هذا التناسب يلخص دور درجة الحرارة والاحتمال في هذا النظام.

3-2- طريقة مونت كارلو:

طريقة مونت كارلو هي فئة من الخوارزميات الحاسوبية والتي يمكن تطبيقها على نطاقات واسعة من المشاكل، هي ليست أداة إحصائية ولكنها تعتمد على أخذ عينات عشوائية متكررة، وتقدم حلول تقريبية بشكل عام. تُستخدم في الحالات التي لا توجد فيها تحليلات أو حلول عددية أو الحالات التي يصعب تنفيذها. هي طريقة بسيطة لكنها قوية لمحاكاة مثل هذا النظام باستخدام العشوائية (العينات العشوائية المتكررة التي تعتمد عليها طريقة مونت كارلو). تُستخدم خوارزمية Metropolis للتقلع عبر النظام وتحديد الدوران عند نقطة معينة والتي تم تنفيذها باستخدام لغة البرمجة بايثون وتتلخص بالخطوات التالية:

- نقوم بتهيئة الشبكة $N \times N$ بقيم عشوائية إما 1 أو -1.
- تحديد تابع يكرر أكثر من N^2 من العناصر المختارة عشوائياً من الشبكة، ولكل منها، تحسب طاقة التشكيل الحالي، والطاقة إذا تم عكس الدوران.
- إذا كانت طاقة التشكيل المعكوس أقل، فإن دوران ذلك الإلكترون ينقلب. وإلا فإنه ينقلب مع احتمال معطى بواسطة:

$$P(\text{spin flips}) = \exp\left(\frac{-(E_{\text{next}} - E_{\text{current}})}{k_B T}\right) \dots \dots \dots (2)$$

حيث:

E_{current} : الطاقة الحالية للدوران.

E_{next} : الطاقة التالية للدوران.

- يتم تنفيذ ذلك عن طريق مقارنة $P(\text{spin flips})$ مع رقم تم إنشاؤه عشوائياً في المجال $[0, 1]$.
- نجري بعد ذلك عدداً من عمليات المسح (يتم تخزين هذا الرقم في التكرارات المتغيرة) للشبكة الكاملة وتخزين المعلومات التي نرغب في تحليلها في القوائم.

نستخدم هذا النموذج لجمع البيانات حول المغناطيس الحديدي المحاكى. وبالتالي، سنقوم بحساب ما يلي:

- إجمالي العزم المغناطيسي "المغطة"، معرف بواسطة $M = \sum_i S_i$ كتابع لعدد عمليات المسح. [تتوافق $M=1$ مع أقصى عزم مغناطيسي (تشير جميع الدورانات إلى الأعلى) و $M=0$ لا تتوافق مع أي لحظة مغناطيسية كبيرة (تلغي جميع الدورانات)].

• العزم المغناطيسي التراكمي (أي مجموع كل العزوم المغناطيسية حتى نقطة ما). نبدأ في تخزين اللحظة المغناطيسية التراكمية بعد عدد معين من التكرارات.

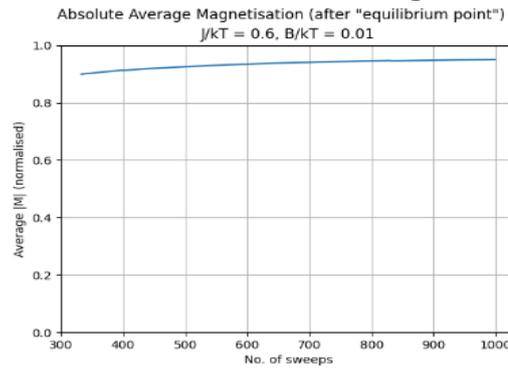
- متوسط المغطة "النهائية" كتابع لـ $J/k_B T$. سيساعدنا ذلك على مراقبة انتقال الطور بشكل أفضل عند درجة

$$J/k_B T \approx 0.44 \text{ الحرارة الحرجة}$$

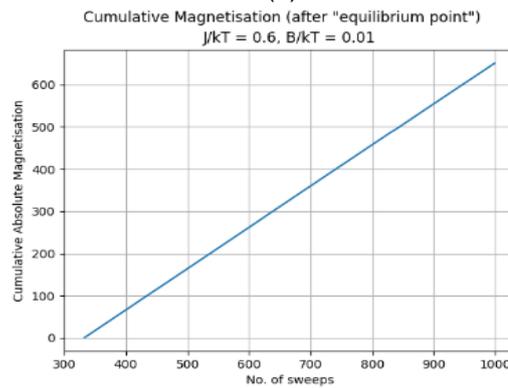
4- التطبيق العملي:

4-1- بيانات المغنطة كدالة لخطوات مونت كارلو:

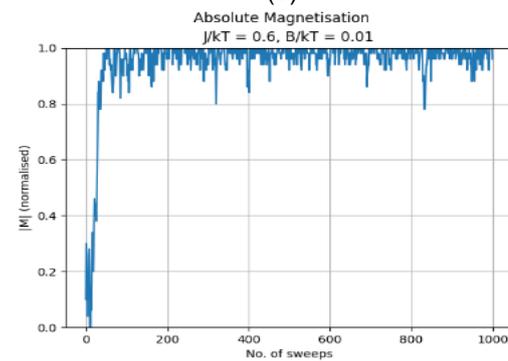
تم جمع البيانات وتحليلها من أجل أبعاد الشبكة $N = 30$ ، مع عدد خطوات خوارزمية مونت كارلو مساويا 1000 خطوة. وذلك لثلاث حالات تم فيها أخذ قيمة ثابتة للحقل المغناطيسي الخارجي $\frac{B}{k_B T} = 0.01$ مع تغيير درجة الحرارة (أعلى من درجة الحرارة الحرجة: $\frac{J}{k_B T} = 0.6$ ، قريبة من درجة الحرارة الحرجة: $\frac{J}{k_B T} = 0.4$ وأقل منها: $\frac{J}{k_B T} = 0.2$):



(a)



(b)

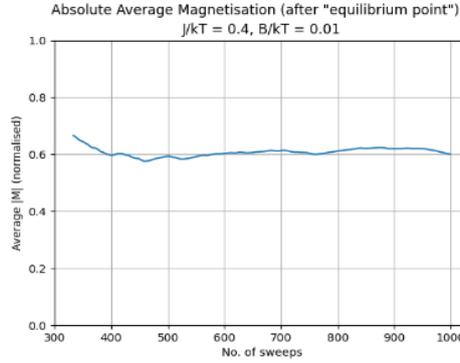


(c)

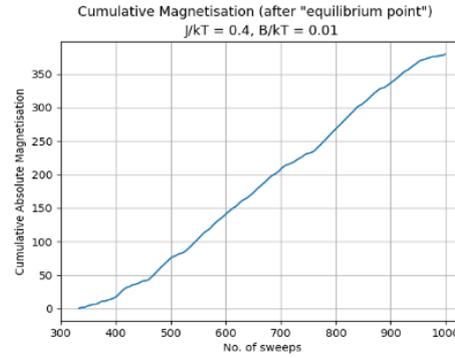
الشكل (2): (a) المغنطة المتوسطة المطلقة، (b) المغنطة التراكمية، (c) المغنطة المطلقة.

يبين الشكل (2) تغيرات قيم المغنطة عند قيمة ثابتة للحقل المغناطيسي الخارجي و درجة حرارة أعلى من درجة الحرارة الحرجة $\frac{J}{k_B T} = 0.6$ ، وكل الأشكال مرسومة بالنسبة لعدد خطوات خوارزمية مونت كارلو. كما نتوقع من نموذجنا، فإن المغناطيسية $|M|$ تصل بسرعة إلى قيم قريبة من 1 (كل الدورانات متوازية

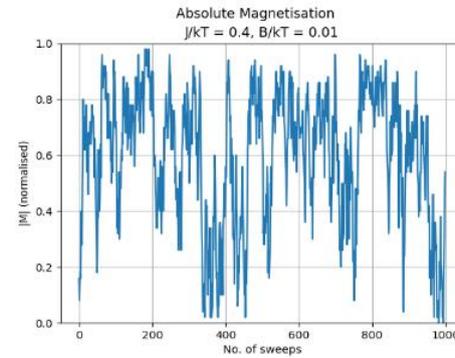
تقريباً)، ولا تختلف كثيراً هناك. يرجع السبب في اختلافها دائماً إلى حقيقة أن التأثيرات الميكانيكية الكم للعشوائية والاحتمالية تعمل باستمرار، بغض النظر عن اعتبارات الطاقة. يعكس الرسمان البيانيان الشكل (2-b) والشكل (2-c) حقيقة أن المغنطة تظل ثابتة إلى حد ما بمجرد اختفاء الحالة الأولية للتأثيرات.



(a)



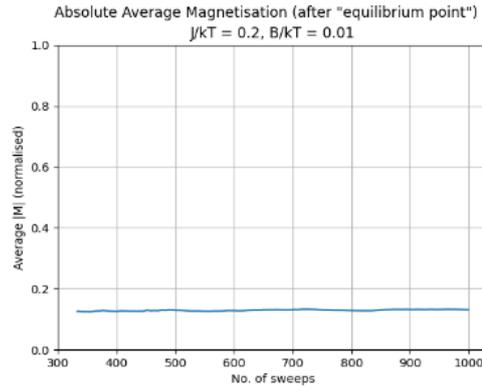
(b)



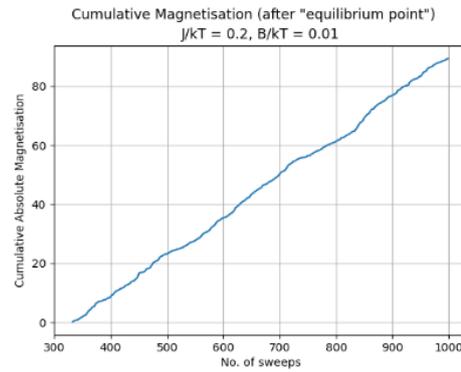
(c)

الشكل (3): (a) المغنطة المتوسطة المطلقة، (b) المغنطة التراكمية، (c) المغنطة المطلقة.

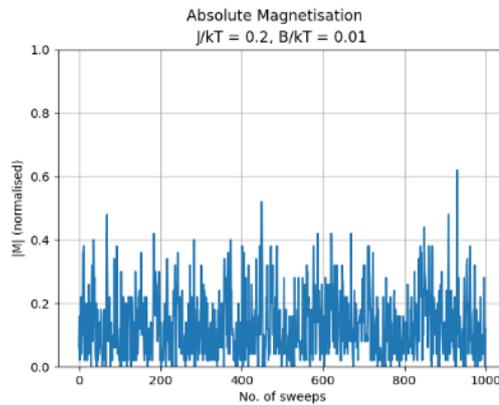
يبين الشكل (3) تغيرات قيم المغنطة عند نفس القيمة للحقل المغناطيسي الخارجي و درجة حرارة قريبة من درجة الحرارة الحرجة $\frac{J}{k_B T} = 0.4$ ، كما أن جميع الأشكال مرسومة بالنسبة لعدد خطوات خوارزمية مونت كارلو. نلاحظ أن هذه القيمة لـ $\frac{J}{k_B T}$ قريبة من انتقال الطور للمغناطيس الحديدي . كما يمكننا أن نرى أن $|M|$ يأخذ نطاقاً واسعاً من القيم ولا يستقر أبداً بالقرب من نقطة. كما أن الرسوم البيانية الشكل (3-b) والشكل (3-c) ليست ثابتة كما في الحالة السابقة.



(a)



(b)



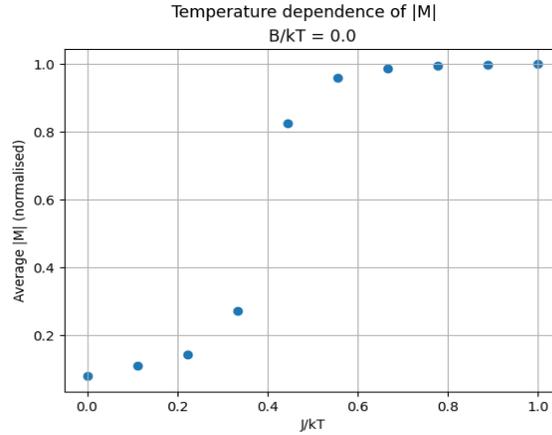
(c)

الشكل (4): (a) المغنطة المتوسطة المطلقة، (b) المغنطة التراكمية، (c) المغنطة المطلقة.

يبين الشكل (4) تغيرات قيم المغنطة عند نفس القيمة للحقل المغناطيسي الخارجي و درجة حرارة أقل من درجة الحرارة الحرجة $\frac{J}{k_B T} = 0.2$ ، و جميع الأشكال مرسومة بالنسبة لعدد خطوات خوارزمية مونت كارلو. يمكننا أن نرى أن $|M|$ يأخذ قيمة قريبة من الصفر، مما يشير إلى عدم وجود لحظة مغناطيسية واضحة. هذا ما نتوقعه، حيث تنهار المغنطة عند درجات حرارة أعلى من درجة الحرارة الحرجة. يعكس الرسمان البيانيان الشكل (b) والشكل (c) هذه الحقيقة أيضًا. نلاحظ أيضًا الاختلاف الكبير في مقياس الرسم البياني (4b).

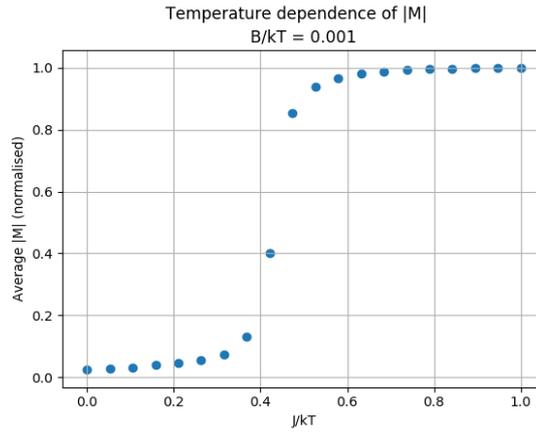
2-4- الاعتماد على درجة الحرارة للمغناطيسية:

تم جمع البيانات مرة أخرى وتحليلها من أجل أبعاد الشبكة $N = 30$ ، مع عدد خطوات خوارزمية مونت كارلو مساويا 1000 خطوة. تم القيام بذلك لثلاث قيم مختلفة من $\frac{B}{k_B T}$.



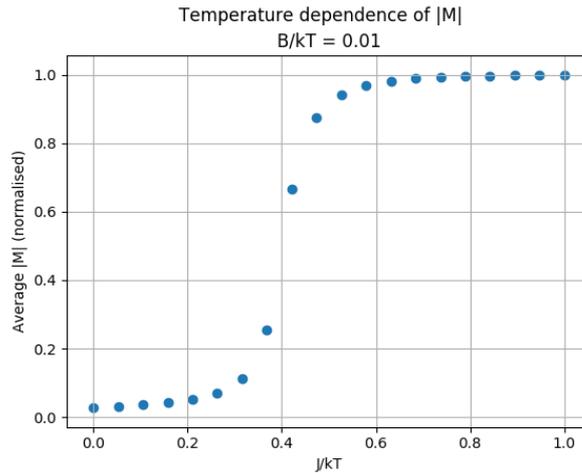
الشكل(5): $|M|$ مقابل $\frac{J}{k_B T}$ من أجل $\frac{B}{k_B T} = 0.0$

يبين الشكل(5) القيمة النهائية لمتوسط المغنطة المطلقة بعد 1000 خطوة من خطوات مونت كارلو مرسومة مقابل $\frac{J}{k_B T}$ ل 10 قيمة متباعدة خطياً ل $\frac{J}{k_B T}$ بين 0 و 1 من أجل حقل مغناطيسي خارجي معدوم $\frac{B}{k_B T} = 0.0$.



الشكل(6): $|M|$ مقابل $\frac{J}{k_B T}$ من أجل $\frac{B}{k_B T} = 0.001$

في الشكل(6) تم زيادة قيمة الحقل المغناطيسي الخارجي $\frac{B}{k_B T} = 0.001$ (حقل مغناطيسي خارجي معدوم تقريبا) من أجل 20 قيمة متباعدة خطياً ل $\frac{J}{k_B T}$ بين 0 و 1 . توضح الأشكال البيانية (5) و (6) بوضوح انتقالات الطور التي تحدث حول درجة الحرارة الحرجة $J/k_B T \approx 0.44$. بالنسبة لقيم $J/k_B T$ أصغر من ذلك ، لا يوجد أي مغنطة تقريباً ، بينما بالنسبة للقيم الأكبر ، تكون المغنطة قريبة جداً من القيمة القصوى.



الشكل (7): $|M|$ مقابل $\frac{J}{k_B T}$ من أجل $\frac{B}{k_B T} = 0.01$

في الشكل (7) تم زيادة الحقل المغناطيسي الخارجي لتصبح $\frac{B}{k_B T} = 0.01$ ، يمكننا أن نرى أن القيمة الأعلى للحقل الخارجي B ، تتوافق مع قيمة أعلى لـ M حول انتقال الطور. وذلك لأن المجال الخارجي يحاول أيضاً محاذاة ثنائيات الأقطاب المغناطيسية في اتجاهها.

5- النتائج:

تظهر النتائج عند دراسة بيانات المغنطة من أجل حقل مغناطيسي خارجي ثابت، أن المغنطة تكون شبه معدومة من أجل درجات حرارة منخفضة وأقل من درجة الحرارة الحرجة، عند درجة الحرارة الحرجة لا توجد قيمة مغناطيسية ثابتة أما عند ارتفاع درجة الحرارة أعلى من درجة الحرارة الحرجة نلاحظ وصول المغنطة للقيمة العظمى. كما نلاحظ أن قيمة المغنطة تزداد عند زيادة الحقل المغناطيسي الخارجي المطبق. أثبت تطبيق نموذج Ising للمغناطيسية الحديدية باستخدام خوارزمية Metropolis أنه نموذج بسيط ولكنه دقيق لظاهرة هي، في الواقع، أكثر تعقيداً بكثير مما يوحي به النموذج. تتوافق النتائج بشكل إيجابي مع التوقعات النظرية.

هذا النموذج، مع ذلك، لديه بعض العيوب. حيث يؤدي العدد الكبير من التكرارات وعمليات المسح إلى أن تستغرق البرامج وقتاً طويلاً جداً للتشغيل. يؤدي الحجم المحدود للشبكة أيضاً إلى بعض الخطأ في نتائج المحاكاة.

في الختام، يعد نموذج Ising مقدمة لتحويلات الطور ونظرية المغناطيسية الاحتمالية. إنه مثال عملي ومفيد للغاية لطرق مونت كارلو، ويوفر فهماً بديهيًا للمفاضلة بين تقليل الطاقة وزيادة الانتروبيا من خلال درجة الحرارة.

6- المراجع:

- [1] El Mehdi Salmani, Omar Mounkachi, El mostafa Benchafia, Mustapha Dehmani, Hamid Ez- Zahraouy, Abdelilah Benyoussef, The enhanced magnetic and magnetocaloric properties of DyNi₄Si nanostructures: First Principle study and Monte-Carlo simulation, 2017.
- [2] A.Feraoun and M.Kerouad, Nano-graphene monolayer with higher-order exchange couplings: Monte Carlo study, Faculty of Sciences, University Moulay Ismail, Morocco. 2017.
- [3] Zhou Peng, Wei Wang, Dan Lv, Rui-jia Liu, Qi Li, Magnetic properties of a cubic nanoisland in the longitudinal magnetic field : A Monte Carlo study, 2017.
- [4] Dan Lv, Ye Ma, Xiao-hong Luo, Wei Jiang, Feng Wang, Qian Li, Monte Carlo study of magnetization plateaus and thermodynamic properties of a nano-graphene with a sandwich-like structure in a longitudinal magnetic field,2020.
- [5] N. J. Giordano and H. Nakanishi, Computational Physics. Prentice-Hall, 2006.
- [6] J. Kotze, Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet. 2008.
- [7] Ferromagnetism Lab Script. Oxford Physics Practical Course, 2018.
- [8] S. J. Blundell and K. M. Blundell, Concepts in Thermal Physics. Oxford Univ. Press, 2010.