

Распределение случайных полей обменного взаимодействия и магнитные фазовые переходы

В. И. Белокопъ, К. В. Нефедев, О. И. Дьяченко

В рамках модели Изинга вычислены критические концентрации “магнитных” атомов, при которых возможны магнитные фазовые переходы в случае прямого и косвенного обменного взаимодействия. Определены условия концентрационных фазовых переходов между различными типами магнитного упорядочения при температуре $T = 0$ К. Результаты, полученные для критических концентраций, близки к перколяционным порогам.

Ключевые слова: модель Изинга, случайные поля обменного взаимодействия, прямой обмен, взаимодействие Рудермана – Киттеля – Касуя – Йошиды (РККИ), критическая концентрация, фазовые переходы.

Using the Ising model the critical concentrations of magnetic phase transitions are calculated in the case of direct and indirect exchange interactions. The conditions of the concentration phase transitions between different types of magnetic ordering at the temperature $T = 0$ K are shown. The obtained critical concentration are close to the percolation threshold.

Keywords: Ising model, random fields with exchange interaction, the direct exchange, interaction Ruderman – Kittel – Kasuya – Yoshida (RKKY), critical concentration, phase transitions.

Введение

Магнитные свойства сплавов и соединений с неупорядоченным распределением магнитных атомов в кристаллической решетке исследуются уже достаточно давно. Этой теме посвящено большое количество монографий [1 – 5] и обзорных публикаций в периодических изданиях, например, [6, 7]. В большинстве подходов к описанию магнетизма неупорядоченных и квазиупорядоченных сред используется предположение о случайном распределении обменных интегралов в гамильтониане спин-спинового взаимодействия, причем параметры функции распределения должны быть согласованы с экспериментальными данными. Нами в работах [8, 9] был сформулирован несколько иной подход, который позволяет в рамках модели Изинга определить функцию распределения случайных полей обменного взаимодействия, параметры которой согласованы между собой и вычисляются с использованием закона взаимодействия спинов (или магнитных моментов частиц, кластеров, зерен и т.п.).

Цель работы — применение метода случайных полей обменного взаимодействия к оценке критических концентраций “ферромагнитных” атомов, растворенных в узлах кристаллической решетки твердого раствора.

Плотность распределения полей взаимодействия

В работе [8] плотность распределения случайных полей взаимодействия вычисляется следующим образом:

$$W(H) = \iint \delta \left(H - \sum_k \Phi_k(\vec{m}_k, \vec{r}_k) \right) \Pi_k \Phi_k(\vec{m}_k, \vec{r}_k) d\vec{m}_k d\vec{r}_k, \quad (1)$$

где $\Phi_k = \Phi_k(\vec{m}_k, \vec{r}_k)$ — поле, создаваемое в начале координат частицами, расположенными в точках с координатами \vec{r}_k и обладающими магнитными моментами \vec{m}_k , $\Phi_k(\vec{m}_k, \vec{r}_k)$ — плотность распределения частиц по координатам \vec{r} и магнитным моментам \vec{m} ,

$$\Phi_k(\bar{m}_k, \bar{r}_k) = f(\bar{r}_k) \tau(\bar{m}_k). \quad (2)$$

Здесь $f(\bar{r}_k)$ и $\tau(\bar{m}_k)$ — плотности распределения частиц по координатам и магнитным моментом, соответственно.

Для кристаллических ферромагнетиков

$$f(\bar{r}_k) = \delta(\bar{r}_k - \bar{r}_{k,0}), \quad (3)$$

где $\bar{r}_{k,0}$ — координаты узлов решетки.

Для модели Изинга кристаллического ферромагнетика, имеющего N узлов и N_0 ферромагнитных частиц, в случае одинаковых частиц с моментом m_0 справедливо следующее равенство

$$\tau_k(m_k) dm_k d\theta_k = [\alpha_k \delta(\theta_k) + \beta_k \delta(\theta_k - \pi)] \times \\ \times \left[\frac{N - N_0}{N} \delta(m_k) + \frac{N_0}{N} \delta(m_k - m_0) \right] dm_k d\theta_k, \quad (4)$$

где α_k и β_k — относительное число частиц, ориентированных в “положительном” и “отрицательном” направлениях, соответственно, θ_k — угол между m_k и осью Z , m_0 — магнитный момент, приходящийся на одну частицу, $\alpha_k + \beta_k = 1$, $\delta(\theta_k)$ — дельта-функция Дирака. Характеристическая функция (Фурье образ $W(H)$)

$$A(\rho) = \int W(H) \exp(i\rho H) dH = \\ = \Pi_k \left[(1 - p) + p \left(\alpha \exp\{i\rho \phi_k(m_0, r_{k,0})\} + \right. \right. \\ \left. \left. + \beta \exp\{-i\rho \phi_k(m_0, r_{k,0})\} \right) \right], \quad (5)$$

где концентрация магнитных частиц $p = N_0/N$. Отсюда, если ограничиться первыми тремя членами разложения экспонент в ряд, легко получить

$$\ln A(\rho) \approx i(\alpha - \beta) \rho p \times \\ \times \sum_k \phi_k - \frac{1}{2!} p [1 - (\alpha - \beta)^2 p] \rho^2 \sum_k \phi_k. \quad (6)$$

Функция распределения случайных полей $W(H)$ как и в случае аморфного ферромагнетика, оказывается “размазанной” δ -функцией вида

$$W(H) = \frac{1}{\sqrt{\pi B}} \exp\left\{ -\frac{[H - H_0(\alpha - \beta)]^2}{B^2} \right\}, \quad (7)$$

$$H_0 = p \sum_k \phi_k, \quad B^2 = 2p [1 - (\alpha - \beta)^2 p] \sum_k \phi_k^2.$$

Напомним, что для аморфных сред

$$H_0 = n \int_V \phi dV, \quad B_0^2 \approx 2n \int_V \phi^2 dV,$$

где n — объемная концентрация [8].

Проведя термодинамическое усреднение α и β в поле H ($\alpha \rightarrow \bar{\alpha}, \beta \rightarrow \bar{\beta}$) и конфигурационное усреднение для относительной намагниченности M , приходящейся на один узел, получим уравнение

$$M = \int \tanh\left\{ \frac{m_0 H}{kT} \right\} W(H) dH, \quad (8)$$

где $M = (\bar{\alpha} - \bar{\beta})$.

Существенного упрощения уравнения (8) можно достичь, если заменить функцию распределения

$$W(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi B}} \exp\left\{ -\frac{x^2}{B^2} \right\} \quad (9)$$

прямоугольной

$$\tilde{W}(x) = \begin{cases} 0, & -B > x, B < x, \\ \frac{1}{2B}, & -B \leq x \leq B. \end{cases} \quad (10)$$

В работе [9] приведены примеры численного решения уравнения для M с точной и приближенной функциями, из которых следует, что вблизи точек фазового перехода (малые M и B) погрешность в вычислениях незначительна. Дополнительными аргументами в пользу возможности такой замены можно считать оценку критической плотности p_c , соответствующей протеканию, которую легко получить, если рассмотреть уравнение (8) для случая прямого обмена.

Из уравнения

$$M = \frac{1}{2B} \int_{-B}^B \tanh\left\{ \frac{m_0(H + MH_0)}{kT} \right\} dH \quad (11)$$

следует, что точка Кюри определяется из соотношения

$$\frac{H_0}{B} \tanh\left\{ \frac{m_0 B}{kT} \right\} = 1. \quad (12)$$

Действительно, для малых M и, соответственно, малого MH_0 при разложении в ряд:

$$\tanh\left\{ \frac{m_0 H}{kT} + \frac{MH_0}{kT} \right\} = \tanh(X + \alpha) = \\ = \tanh X + \tanh' X \alpha + \frac{1}{2!} \tanh'' X \alpha^2 + \frac{1}{3!} \tanh''' X \alpha^3.$$

После интегрирования данного выражения с учетом четности $\tanh' X$ и $\tanh'' X$ для M^2 получим:

$$M^2 = \frac{3 \left(\frac{H_0}{B} \tanh\left\{ \frac{m_0 B}{kT} \right\} - 1 \right)}{\frac{H_0^3}{Bk^2 T^2} \left[\tanh\left\{ \frac{m_0 B}{kT} \right\} - \tanh^3\left\{ \frac{m_0 B}{kT} \right\} \right]}. \quad (13)$$

Очевидно, что условие $H_0/B = 1$ определяет минимальную концентрацию p_c , ниже которой упорядочение невозможно, даже при $T = 0$. Следует отметить, что предельная концентрация p_c , в отличие от точки Кюри, не зависит от интенсивности взаимодействия и определяется лишь видом функции $\varphi(r)$ и типом кристаллической решетки. Для прямого обмена $\varphi_k = f_0$, поэтому суммирование необходимо проводить по ближайшим соседям. Отсюда,

$$\gamma = \frac{H_0}{B_0} = \frac{p_c z f_0}{\sqrt{2 p_c z f_0}} = 1, \quad p_c = \frac{2}{z}, \quad (14)$$

где z — число ближайших соседей.

Вычисленные с помощью формулы (14) критические плотности p_c близки к известным результатам, приведенным в работах по теории протекания [12–15].

Взаимодействие Рудермана – Киттеля – Касуя – Йошиды (РККИ)

Для косвенного знакопеременного РККИ-взаимодействия “напряженность обменного поля” выглядит следующим образом:

$$\varphi = AF(x), \quad (15)$$

где $x = 2k_F R$, k_F — импульс электрона на поверхности Ферми, R — расстояние между взаимодействующими атомами,

$$F(x) = \frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x^4}, \quad (16)$$

A — имеет размерность магнитного поля и определяет интенсивность обменного взаимодействия.

Поскольку для “стандартных” металлов $k_f^3 = 3\pi^2 n_s$, где n_s — концентрация электронов проводимости, импульс Ферми сопоставим с параметром решетки ($k_F \sim a^{-1}$), результаты суммирования в формулах для H_0 и B_0^2 могут нелинейным образом зависеть от расположения взаимодействующих атомов, то есть от типа кристаллической решетки. Известно, что расстояние между атомами для различных решеток может быть вычислено так:

1) простая кубическая (ПК 3 D):

$$R_{n_1, n_2, n_3} = a\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}; \quad (17)$$

2) гранецентрированная кубическая (ГЦК 3 D)

$$R_{n_1, n_2, n_3} = \frac{a}{2}\sqrt{(n_1 + n_2)^2 + (n_1 + n_3)^2 + (n_2 + n_3)^2}; \quad (18)$$

3) объемноцентрированная кубическая (ОЦК 3 D)

$$R_{n_1, n_2, n_3} = \frac{a}{2}\sqrt{(n_1 + n_2 - n_3)^2 + (n_1 + n_3 - n_2)^2 + (n_2 + n_3 - n_1)^2}; \quad (19)$$

4) простая квадратная (ПК 2 D)

$$R_{n_1, n_2} = a\sqrt{n_1^2 + n_2^2}, \quad (20)$$

где n_1 , n_2 и n_3 — целые числа, a — число атомов, находящихся на определенных одинаковых расстояниях, равно числу корней уравнения (17) – (20).

Параметры функции распределения H_0 и B^2 для кристаллических магнитных сплавов, имеющих заданный тип упаковки, можно получить суммированием:

$$H_0 = pA \sum_{n_1, n_2, n_3} F(2k_F R_{n_1, n_2, n_3}), \quad (21)$$

$$B^2 = 2pA^2 \sum_{n_1, n_2, n_3} F^2(2k_F R_{n_1, n_2, n_3}). \quad (22)$$

При вычислении H_0 и B^2 следует иметь в виду, что в случае, когда атом отдает один электрон в валентную зону, концентрация свободных электронов $n_s = 4/a^3$ для ГЦК-решетки, для ОЦК имеем $2/a^3$ и для простой кубической решетки $1/a^3$.

Численные оценки параметров функции распределения $W(H)$, проведенные с учетом первых 500 атомных слоев уравнений (17) – (20), при условии что суммы (21) – (22) выходят на насыщение:

$$\text{ГЦК 3 D: } H_0 = 0,031pA, B = 0,017\sqrt{pA},$$

$$\frac{H_0}{B} = 2,66\sqrt{p};$$

$$\text{ОЦК 3 D: } H_0 = 0,031pA, B = 0,011\sqrt{pA},$$

$$\frac{H_0}{B} = 2,74\sqrt{p};$$

$$\text{ПК 3 D: } H_0 = 0,0162pA, B = 0,163\sqrt{pA},$$

$$\frac{H_0}{B} = 0,99\sqrt{p}.$$

Из этих данных следует, что для ГЦК-решетки при наличии только РККИ-взаимодействия в стандартных металлах возможно как ферромагнитное упорядочение при $p > p_c \cong 0,14$, так и состояние типа спинового стекла при $p < p_c$. В случае ОЦК-решетки со случайным разбавлением по узлам ферромагнетизм существует при $p > p_c \cong 0,13$. В ПК-решетке возможно лишь спиновое стекло при низких температурах и парамагнетизм при высоких.

Если каждый атом отдает два электрона в валентную зону, концентрация свободных электронов $n_s = 8/a^3$ для ГЦК-решетки, в случае ОЦК — имеем $4/a^3$ и для простой кубической решетки — $2/a^3$.

$$\text{ГЦК 3 D: } H_0 = -0,0142 pA, B = 0,0068\sqrt{p}A,$$

$$\frac{|H_0|}{B} = 2,088\sqrt{p};$$

$$\text{ОЦК 3 D: } H_0 = -0,0202 pA, B = 0,0059\sqrt{p}A,$$

$$\frac{|H_0|}{B} = 3,44\sqrt{p};$$

$$\text{ПК 3 D: } H_0 = 0,0029 pA, B = 0,0020\sqrt{p}A,$$

$$\frac{H_0}{B} = 1,47\sqrt{p}.$$

В ГЦК-решетке при наличии только РККИ-взаимодействия возможно антиферромагнитное упорядочение при $p > p_c \cong 0,23$. Для ОЦК — антиферромагнетизм существует при $p > p_c \cong 0,08$. В случае ПК — ферромагнетизм существует при $p > p_c \cong 0,46$.

Если каждый атом отдает 3 электрона в валентную зону, концентрация свободных электронов $n_s = 12/a^3$ для ГЦК-решетки, в случае ОЦК — имеем $6/a^3$ и для простой кубической решетки — $3/a^3$.

$$\text{ГЦК 3 D: } H_0 = -0,0089 pA, B = 0,0039\sqrt{p}A,$$

$$\frac{|H_0|}{B} = 2,30\sqrt{p};$$

$$\text{ОЦК 3 D: } H_0 = -0,00496 pA, B = 0,0045\sqrt{p}A,$$

$$\frac{|H_0|}{B} = 1,11\sqrt{p};$$

$$\text{ПК 3 D: } H_0 = -0,00534 pA, B = 0,00535\sqrt{p}A,$$

$$\frac{|H_0|}{B} = 0,998\sqrt{p}.$$

В случае ГЦК-решетки при наличии только РККИ-взаимодействия возможно антиферромагнитное упорядочение при $p > p_c \cong 0,19$. Для ОЦК — антиферромагнетизм существует при $p > p_c \cong 0,8$. В ПК — возможно лишь антиферромагнитное спиновое стекло.

Критическая концентрация планарного разбавленного кристаллического ферромагнетика p_c может быть определена из отношения параметров функции распределения, так же, как это было показано выше для 3D решеток. Для короткодействующего прямого обмена между атомами “магнитной” примеси, случайным образом распределенной по узлам простой квадратной решетки (2D) $p_c = 0,5$, см. формулу (14).

Данный результат близок к оценке перколяционного порога для этой решетки в случае протекания по узлам [13, 14].

Известно, что в двумерных решеточных структурах РККИ-взаимодействие убывает обратно пропорционально квадрату расстояния от атома магнитного включения

$$F_{2D\dot{I}\dot{I}}(x) = \frac{\sin(x)}{x^2}, \quad (23)$$

где $x = 2k_f R$. Ферми-импульс электрона проводимости

планарных решеток $k_f^2 = 2\pi n_s$. В одновалентном приближении, для простой квадратной решетки с РККИ-обменом между атомами примеси через электроны проводимости, с плотностью $1/a^2$, критическая концентрация между спинами $p_c = 0,52$.

Выводы

Метод случайных полей обменного взаимодействия в модели Изинга позволяет оценить критические концентрации и определить условия существования ферромагнетизма, антиферромагнетизма и спинового стекла, а также условия концентрационных фазовых переходов между этими типами магнитного упорядочения при $T = 0$. Расчеты были выполнены для прямого и косвенного обменного взаимодействий, имеющих место между атомами магнитных включений, случайно распределенных по узлам решеток с широко известной геометрией и реализующих плотную упаковку. Для косвенного знакопеременного обмена показана возможность смены типа упорядочения в случае изменения концентрации свободных носителей. Правильность метода и обоснованность используемых в расчетах приближений, в дополнение к непротиворечивым в физическом смысле результатам, подтверждается и наблюдаемой близостью вычисленных значений критических концентраций к значениям порогов протекания для исследуемых решеток.

Работа была поддержана грантом АВЦП 2.1.1/992 “Поддержка научного потенциала высшей школы”, НОЦ Госконтракт №02.740.11.0549 “Магнитные свойства и спин-транспортные явления в наноразмерных конденсированных средах” и Госконтракт №14.740.11.0289 “Разработка программ ЭВМ на основе алгоритмов параллельного программирования и оптимизация высокопроизводительной распределенной вычислительной среды для решения естественнонаучных задач”.

Литература

1. Гинзбург С. Л. Необратимые явления в спиновых стеклах. М.: Наука, 1989, 148 с.
2. Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф. Спиновые стекла. М.: Знание, 1984, 215 с.
3. Nishimori H. Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction. USA: Oxford University Press, 2001, 243 p.
4. Talagrand M. Spin glasses: a challenge for mathematicians cavity and mean field models. Berlin: Springer, 2003, 586 p.
5. Coniglio A., Herrmann H.J., Fierro A. et al. Unifying concepts in granular media and glasses. Elsevier Science, 2004, 232 p.
6. Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф. Спиновые стекла и неэргодичность. УФН, 1989, т. 57, № 2, с. 267-310.
7. Доценко В. С. Физика спин-стекольного состояния. УФН, 1993, т. 163, №. 6, с. 1 - 37.
8. Белоконов В. И., Нефедев К. В. Функция распределения случайных полей взаимодействия в неупорядоченных магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло. Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2001, т. 120, № 1(7), с. 156 – 164.
9. Белоконов В. И., Нефедев К. В. Магнитные фазовые переходы в аморфных системах с конкурирующими обменными взаимодействиями. ФТТ, 2002, т. 44, № 9, с. 1632 – 1634.
10. Sherrington D., Kirkpatrick S. Solvable model of a spin-glass. Phys. Rev. Lett., 1975, v. 35, p. 1792 – 1796.
11. Sherrington D., Kirkpatrick S. Infinite-ranged models of spin-glasses. Phys. Rev., 1978, v. 17, p. 4384 – 4386.
12. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982, 264 с.
13. Stauffer D. Introduction to percolation theory. London: Taylor&Francis, 1985, 74 p.
14. Кирпатрик С. Перколяция и проводимость, в сб.: Теория и свойства неупорядоченных материалов. М.: Мир, 1977, 50 с.
15. Kirkpatrick S. Percolation and conduction. Rev. Mod. Phys., 1973, v. 45, p. 547 – 557.

Статья поступила в редакцию 21.11.2011 г.

Валерий Иванович Белоконов — Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток), доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой. Специалист в области физики конденсированного состояния (магнитные явления). E-mail: belokon@ifit.phys.dvgu.ru.

Нефедев Константин Валентинович — Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток), кандидат физико-математических наук, доцент. Специалист в области физики конденсированного состояния (магнитные явления) и суперкомпьютерных технологий. E-mail: knefedev@phys.dvgu.ru.

Дьяченко Ольга Игоревна — Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток), аспирантка второго года очной формы обучения по специальности “Теоретическая физика”. E-mail: tkacholga08@rambler.ru.