ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2020, том 121, № 8, с. 802–806

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.611.4

МНОГООБРАЗИЕ ВИДОВ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ: МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В. И. Белоконь[a], *, О. И. Дьяченко[a], Р. В. Лапенков[a], Е. В. Чибиряк[a]

[a] *Школа естественных наук, Дальневосточный федеральный университет, ул. Суханова, 8, Владивосток, 690950 России*

**e-mail: dyachenko.oi@dvfu.ru*

Поступила в редакцию 29.10.2019 г.
После доработки 14.01.2020 г.
Принята к публикации 16.01.2020 г.

В рамках метода случайных полей обменного взаимодействия и модели Изинга проведено исследование различных вариантов магнитного упорядочения в двухподрешеточных магнетиках с обменным взаимодействием. Выявлены условия возникновения намагниченности в данных системах. Получены уравнения, позволяющие определить температуры фазовых переходов.

Ключевые слова: метод случайного поля, модель Изинга, магнитное упорядочение

DOI: 10.31857/S0015323020060030

ВВЕДЕНИЕ

Магнетизм известен с древних времен, однако в этой области до сих пор ведутся интенсивные исследования. Во многом это связано с появлением новых магнитных материалов (таких как спиновое стекло, спиновый лед), которые используются в различных технических устройствах, в том числе устройствах вычислительной техники.

Простейшим классическим методом описания свойств магнитных систем с обменным взаимодействием является теория молекулярного поля. Однако она не способна описывать все многообразие видов магнитного упорядочения.

Одним из подходов, позволяющих расширить возможности применения и при этом сохранить простоту теории молекулярного поля, является теория случайных полей обменного взаимодействия [1, 2]. В этой теории функция распределения поля зависит от закона взаимодействия частиц. В частности, это может быть прямой обмен или РККИ-взаимодействие. Преимущество этого подхода по сравнению с обычной теорией молекулярного поля в том, что он позволяет количественно описать фазовые переходы в системах с любым законом обмена, а также дает возможность оценить критическую концентрацию взаимодействующих частиц, ниже которой фазовый переход невозможен [3].

Например, в работе [4] решена задача о концентрационных фазовых переходах в двухподрешеточных магнитных системах. В работе [5] рассмотрены магнитные фазовые переходы в тонких пленках.

Так как многие магнитные материалы по существу являются сплавами, состоящими из атомов разного сорта, то особый интерес представляет исследование магнитного упорядочения в таких материалах. Цель данной статьи – рассмотрение в рамках теории случайных полей взаимодействия и модели Изинга различных вариантов магнитного упорядочения в двухподрешеточных магнетиках с обменным взаимодействием.

ТЕОРИЯ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В методе случайных полей взаимодействия, который получил дальнейшее развитие в работах [6–8], предполагается, что эффективное (молекулярное) поле взаимодействия H является случайной величиной, распределенной по определенному закону. Случайность может быть связана как со случайным распределением примесей (при концентрации взаимодействующих атомов $p < 1$), так и с ориентацией магнитных моментов соседей. Соответствующая (приближенная) функция распределения поля H для модели Изинга имеет вид

$$W(H) = \frac{1}{\sqrt{\pi}B}\exp\left\{-\frac{\left[H - H_0M\right]^2}{B^2}\right\}. \quad (1)$$

Среднее значение $\langle H\rangle = H_0 M$ и дисперсия $2\sigma^2 = B^2$ полей взаимодействия выражаются следующим образом:

$$H_0 = p\sum_k \varphi_k;\ \ B^2 = 2p\left[1 - M^2 p\right]\sum_k \varphi_k^2. \tag{2}$$

Здесь p — концентрация обменно взаимодействующих частиц, φ_k — эффективное поле обменного взаимодействия, создаваемое атомом с номером k, $M = \langle\alpha\rangle - \langle\beta\rangle$ — средний магнитный момент, приходящийся на один атом, α и β — относительные вероятности ориентации магнитного момента частицы "вверх" и "вниз". Соответствующие значения в фигурных скобках обозначают конфигурационное и термодинамическое усреднение.

Уравнение, определяющее зависимость среднего магнитного момента M от температуры и концентрации атомов, имеет вид

$$M = \int \mathrm{th}\left[\frac{m_0 H}{kT}\right] W(H, M)\, dH, \tag{3}$$

где m_0 — магнитный момент атома. Достоинство системы (1)–(3) состоит в том, что основные характеристики плотности распределения полей взаимодействия (математическое ожидание и дисперсия) не постулируются, а определяются законом взаимодействия φ (m, r). W (H, M) представляет собой "размазанную" δ-функцию, которую в дальнейшем удобно заменить ступенчатой:

$$W(\tilde{H}) = \begin{cases} \dfrac{1}{2B}, & -B \le \tilde{H} \le B; \\ 0, & \tilde{H} < -B,\ \ \tilde{H} > B. \end{cases} \tag{4}$$

Такая замена может быть оправдана только в области малых M, т.е. области фазовых переходов, где ошибка в вычислениях становится незначительной [7]. Отметим, что при $B \to 0$ уравнение (3) оказывается уравнением теории молекулярного поля.

Для $M \ll 1$, используя (3) и (4), можно вывести условия появления отличного от нуля М:

$$\frac{H_0}{B}\,\mathrm{th}\left[\frac{m_0 B}{kT}\right] > 1. \tag{5}$$

Это условие может быть реализовано при

$$\frac{H_0}{B} \ge 1. \tag{6}$$

Выражение для точки Кюри:

$$\frac{H_0}{B}\,\mathrm{th}\left[\frac{m_0 B}{kT_C}\right] = 1. \tag{7}$$

Для случая прямого обмена условие (5) означает появление протекающего кластера. При переходе к теории молекулярного поля условие (5) дает

$$\frac{m_0 H_0}{kT} > 1. \tag{8}$$

Равенство единице определяет парамагнитную точку Кюри, которая всегда выше T_C. В интервале между парамагнитной точкой Кюри и точкой Кюри дальний порядок сменяется ближним, а выше парамагнитной точки Кюри реализуется парамагнетизм. При

$$\frac{H_0}{B} < 1 \tag{9}$$

и T ниже парамагнитной точки Кюри возможно упорядочение типа кластерного стекла.

ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫЕ МАГНЕТИКИ

В случае, если мы имеем две подрешетки, функция распределения случайных полей взаимодействия на атоме первой (второй) подрешетки выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} W(H_1) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}B_1}\exp\left[\frac{-\{H_1 - M_1 H_{011} - M_2 H_{012}\}^2}{B_1^2}\right]; \\ W(H_2) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}B_2}\exp\left[\frac{-\{H_2 - M_1 H_{021} - M_2 H_{022}\}^2}{B_2^2}\right], \end{aligned} \tag{10}$$

где

$$\begin{gathered} B_1^2 = 2p_1\left(1 - M_1^2 p_1\right)\sum_k \varphi_{11k}^2 + 2p_2 \times \\ \times \left(1 - M_2^2 p_2\right)\sum_l \varphi_{12l}^2, \end{gathered} \tag{11}$$

$$H_{011} = p_1\sum_k \varphi_{11k},\ \ H_{012} = p_2\sum_l \varphi_{12l},$$

$$\begin{gathered} B_2^2 = 2p_2\left(1 - M_2^2 p_2\right)\times \\ \times \sum_l \varphi_{22l}^2 + 2p_1\left(1 - M_1^2 p_1\right)\sum_k \varphi_{21k}^2, \end{gathered} \tag{12}$$

$$H_{022} = p_2\sum_l \varphi_{22l},\ \ H_{021} = p_1\sum_k \varphi_{21k},$$

индексы k и l нумеруют атомы первой и второй подрешетки соответственно. Здесь $\varphi_{11} = m_1 J_1$, m_1 — магнитный момент атома первой подрешетки; $\varphi_{12} = m_2 J_{21}$, m_2 — магнитный момент атома второй подрешетки. Для $\varphi_{22} = m_2 J_2$, $\varphi_{21} = m_1 J_{12}$ аналогично, при этом $J_{21} = J_{12}$ — обменные интегралы для атомов из разных подрешеток; p_1 и p_2 концентрации магнитных атомов в первой и второй подрешетках соответственно. M — средний магнитный момент, приходящийся на один атом. В случае прямого обмена получаем:

$$\begin{gathered} B_1^2 = 2p_1\left(1 - M_1^2 p_1\right) z_1 m_1^2 J_1^2 + \\ + 2p_2\left(1 - M_2^2 p_2\right) z_2 m_2^2 J_{12}^2; \end{gathered} \tag{13}$$

$$H_{011} = p_1 z_1 m_1 J_1,\ \ H_{012} = p_2 z_2 m_2 J_{12};$$

$$B_2^2 = 2p_2\left(1 - M_2^2 p_2\right) z_2 m_2^2 J_2^2 + \\ + 2p_1\left(1 - M_1^2 p_1\right) z_1 m_1^2 J_{21}^2; \qquad (14)$$

$$H_{022} = p_2 z_2 m_2 J_2, \quad H_{012} = p_1 z_1 m_1 J_{21};$$

где z_1 и z_2 – число ближайших соседей у атома пер-вой и второй подрешетки, соответственно. В приближении ступенчатой функции распределения по полям взаимодействия (4), для относительных магнитных моментов, приходящихся на один атом подрешетки, получим:

$$M_1 = \frac{1}{2B_1}\times \\ \times \int_{-B_1}^{B_1} \text{th}\left[\frac{m_1}{kT}\left(H_1 + M_1 H_{011} + M_2 H_{012}\right)\right] dH_1; \qquad (15)$$

$$M_2 = \frac{1}{2B_2}\times \\ \times \int_{-B_2}^{B_2} \text{th}\left[\frac{m_2}{kT}\left(H_2 + M_2 H_{022} + M_1 H_{021}\right)\right] dH_2. \qquad (16)$$

Интегрируя (15) и (16), получаем систему уравнений, определяющих относительные магнитные моменты подрешеток:

$$M_1 = \frac{kT}{2B_1 m_1} \ln \frac{\text{ch}\left[\frac{m_1}{kT}\left(M_1 H_{011} + M_2 H_{012} + B_1\right)\right]}{\text{ch}\left[\frac{m_1}{kT}\left(M_1 H_{011} + M_2 H_{012} - B_1\right)\right]}; \qquad (17)$$

$$M_2 = \frac{kT}{2B_2 m_2} \ln \frac{\text{ch}\left[\frac{m_2}{kT}\left(M_2 H_{022} + M_1 H_{021} + B_2\right)\right]}{\text{ch}\left[\frac{m_2}{kT}\left(M_2 H_{022} + M_1 H_{021} - B_2\right)\right]}. \qquad (18)$$

При температурах, близких критической температуре фазового перехода, $M_1 \ll 1$, $M_2 \ll 1$, уравнения (17), (18) при разложении до третьего члена включительно выглядят следующим образом:

$$M_1 = \frac{1}{B_1}\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\left(H_{011}M_1 + H_{012}M_2\right) - \\ - \frac{1}{3B_1}\left(\frac{m_1}{kT}\right)^2 \text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\left(H_{011}M_1 + H_{012}M_2\right)^3 + \\ + \frac{1}{3B_1}\left(\frac{m_1}{kT}\right)^2 \text{th}^3\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\left(H_{011}M_1 + H_{012}M_2\right)^3; \qquad (19)$$

$$M_2 = \frac{1}{B_2}\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\left(H_{022}M_2 + H_{021}M_1\right) - \\ - \frac{1}{3B_2}\left(\frac{m_2}{kT}\right)^2 \text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\left(H_{022}M_2 + H_{021}M_1\right)^3 + \\ + \frac{1}{3B_2}\left(\frac{m_2}{kT}\right)^2 \text{th}^3\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\left(H_{022}M_2 + H_{021}M_1\right)^3. \qquad (20)$$

Выразив в линейном приближении M_2 через M_1 и M_1 через M_2 и подставив в (19), (20), мы получаем уравнения для средних магнитных моментов:

$$M_1^2 = \frac{3}{\left(\frac{m_1}{kT}\right)^2\left[1 - \text{th}^2\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\right]}\times \\ \times \frac{1}{\left\{H_{011} + \frac{H_{012}H_{021}\,\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}{B_2 - H_{022}\,\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}\right\}^2} - \\ - \frac{3B_1}{\left(\frac{m_1}{kT}\right)^2\left[1 - \text{th}^2\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\right]\text{th}^2\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}\times \\ \times \frac{1}{\left\{H_{011} + \frac{H_{012}H_{021}\,\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}{B_2 - H_{022}\,\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}\right\}^3}, \qquad (21)$$

$$M_2^2 = \frac{3}{\left(\frac{m_2}{kT}\right)^2\left[1 - \text{th}^2\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\right]}\times \\ \times \frac{1}{\left\{H_{022} + \frac{H_{012}H_{021}\,\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}{B_1 - H_{011}\,\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}\right\}^2} - \\ - \frac{3B_2}{\left(\frac{m_2}{kT}\right)^2\left[1 - \text{th}^2\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\right]\text{th}^2\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}\times \\ \times \frac{1}{\left\{H_{022} + \frac{H_{012}H_{021}\,\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}{B_1 - H_{011}\,\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}\right\}^3}. \qquad (22)$$

Исходя из того, что разность в правой части не может быть отрицательной, получаем условия возникновения отличного от нуля среднего магнитного момента для обеих подрешеток:

$$\frac{H_{011}}{B_1}\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]\left\{1 + \frac{\frac{H_{012}H_{021}}{H_{011}B_2}\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}{1 - \frac{H_{022}}{B_2}\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}\right\} > 1; \qquad (23)$$

$$\frac{H_{022}}{B_2}\text{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]\left\{1 + \frac{\frac{H_{012}H_{021}}{H_{022}B_1}\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}{1 - \frac{H_{011}}{B_1}\text{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}\right\} > 1. \qquad (24)$$

Опираясь на неравенства (23), (24), можно выделить следующие частные случаи магнитного упорядочения, которые могут возникнуть при выполнении неравенств, записанных ниже:

1. Отсутствие взаимодействия между подрешетками, $H_{012} = H_{021} = 0$. Каждая из подрешеток ниже температуры Кюри упорядочивается ферромагнитно:

$$\frac{H_{011}}{B_1}\operatorname{th}\left[\frac{m_1B_1}{kT_{C,1}}\right] = 1; \quad \frac{H_{022}}{B_2}\operatorname{th}\left[\frac{m_2B_2}{kT_{C,2}}\right] = 1. \tag{25}$$

2. Отсутствие взаимодействия внутри подрешеток, $H_{011} = H_{022} = 0$ и при этом имеется отрицательное обменное взаимодействие между подрешетками. Тогда ниже критической температуры мы имеем ферримагнитное упорядочение:

$$\frac{H_{012}}{B_1}\operatorname{th}\left[\frac{m_1B_1}{kT_C}\right]\frac{H_{021}}{B_2}\operatorname{th}\left[\frac{m_2B_2}{kT_C}\right] = 1. \tag{26}$$

3. Отсутствие взаимодействия внутри подрешеток $H_{011} = H_{022} = 0$, а также равенства $B_1 = B_2 = B$, $H_{012} = H_{021} = H$. Обменное взаимодействие между подрешетками также предполагается отрицательным. В этом случае мы имеем антиферромагнитное упорядочение:

$$\frac{H^2}{B^2}\operatorname{th}^2\left[\frac{mB}{kT_{\mathrm{N}}}\right] = 1, \tag{27}$$

T_{N} – температура Нееля.

4. Предположим, что в первой подрешетке ниже критической температуры реализуется ферромагнитное упорядочение, т.е. имеется отличный от нуля средний магнитный момент $M_1 \neq 0$. В это время во второй подрешетке ниже критической температуры средний магнитный момент равен нулю $M_2 = 0$, но при этом наблюдается отличный от нуля средний квадрат магнитного момента, приходящегося на один атом $\langle M_2^2\rangle \neq 0$, который может свидетельствовать о переходе в сперомагнитное состояние. Вычислим $\langle M_2^2\rangle$ в рамках теории случайных полей взаимодействия:

$$\langle M_2^2\rangle = \frac{1}{2B_2}\times \\ \times\int_{-B_2}^{B_2}\operatorname{th}^2\left[\frac{m_2}{kT}\left(H_2 + M_2H_{022} + M_1H_{021}\right)\right]dH_2. \tag{28}$$

Интегрируя (28), получаем:

$$\langle M_2^2\rangle = 1 - \frac{kT}{2B_2m_2}\times \\ \times\operatorname{th}\left[\frac{m_2}{kT}\left(M_2H_{022} + M_1H_{021} + B_2\right)\right] + \\ + \frac{kT}{2B_2m_2}\operatorname{th}\left[\frac{m_2}{kT}\left(M_2H_{022} + M_1H_{021} - B_2\right)\right]. \tag{29}$$

Из (29) видно, что даже если $M_2 = 0$, то $\langle M_2^2\rangle$ может быть отлично от нуля, т.е. подрешетка может находиться в сперомагнитном состоянии. Согласно [9], такой тип упорядочения, при котором в одной подрешетке имеется ферромагнитное состояние, а во второй отсутствует средний магнитный момент, называется сперимагнитным.

В качестве примера можно рассмотреть двухподрешеточный магнетик со следующими параметрами:

$$H_{011} = J_1m_1z_1; \tag{30}$$

$$H_{022} = J_2m_2z_2, \tag{31}$$

$$H_{012} = J_{12}m_2z_2, \tag{32}$$

$$H_{021} = J_{21}m_1z_1, \tag{33}$$

$$B_1 = \sqrt{2z_1\left(J_1m_1\right)^2 + 2z_2\left(J_{12}m_2\right)^2}, \tag{34}$$

$$B_2 = \sqrt{2z_2\left(J_2m_2\right)^2 + 2z_1\left(J_{21}m_1\right)^2}. \tag{35}$$

Здесь $m_1 = m_2 = 3\mu_{\mathrm{B}} = 3 \times 927 \times 10^{-23}$ Эрг/Гс, $z_1 = 8$, $z_2 = 12$, $J_1 = J_2 = 10^{25}$ Гс^2/Эрг, $J_{21} = J_{12} = -10^{20}$ Гс^2/Эрг, $p = 1$. Приравняв левые части выражений (23) и (24) к единице, определим температуру Кюри, которая для каждой из подрешеток составляет: $T_{\mathrm{C},1} = 410$ K, $T_{\mathrm{C},2} = 630$ K. Если $B \to 0$, то парамагнитная точка Кюри составит 440 K. Соответственно, в интервале $410 < T_{\mathrm{C}} < 440$ K имеет место сперомагнитное упорядочение, в этом случае в одной из подрешеток реализуется спиновое стекло, а в другой – ферромагнетизм.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, метод случайных полей взаимодействия позволяет более точно по сравнению с теорией молекулярного поля оценить температуры фазовых переходов в состояние ферромагнитного, ферримагнитного, антиферромагнитного упорядочения, разделив температуру Кюри и парамагнитную точку Кюри. Кроме того, этот метод дает возможность исследовать переходы в состояние кластерного стекла, сперомагнитного и сперимагнитного упорядочения.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации мнемокод 0657-2020-0005, FZNS-2020-0005.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Belokon V., Nefedev K., Kapitan V., Dyachenko O.* Magnetic states of nanoparticles with RKKY interaction // Adv. Mater. Research. 2013. V. 774. P. 523–527.

2. *Nefedev K., Belokon V.* Magnetic phase transitions in amorphous systems with competing exchange interactions // Phys. Solid State. 2002. V. 44. № 9. P. 1708.
3. *Афремов Л.Л., Белоконь В.И., Дьяченко О.И., Петров А.А.* Метод случайного поля в магнетизме наночастиц. Дальневосточный федеральный ун-т, Владивосток, 2016, 107 с.
4. *Belokon V., Kapitan V., Dyachenko O.* The combination of the random interaction fields' method and the Bethe-Peierls method for studying twosublattice magnets // J. Magn. Magn. Mater. 2016. V. 401. P. 651.
5. *Belokon V., Dyachenko O.* Random interaction fields method: magnetic phase transitions in the thin films // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 374. P. 92.
6. *Belokon V., Semkin S.* Random-field method in the theory of binary-alloys ferromagnetism. // J. Exp. Theor. Phys. 1993. V. 77. № 5. P. 815–818.
7. *Belokon V., Nefedev K.* Distribution function for random interaction fields in disordered magnets: Spin and macrospin glass // J. Exp. Theor. Phys. 2001. V. 93. № 1. P. 136–142.
8. *Belokon V., Trofimov A., Dyachenko O.* Oguchis method and random interaction fields method: Investigation of properties of ferromagnetic materials // J. Magn. Magn. Mater. 2019. V. 471. P. 501.
9. *Хёрд К.М.* Многообразие видов магнитного упорядочения в твердых телах // УФН. 1984. Т. 142. С. 331–355.