

Влияние кристаллической структуры на значения критической температуры и константы обменного взаимодействия объемных ферромагнитных материалов Fe, Co, Ni

Калинин Дмитрий Сергеевич

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Мамонова М. В.

Омск – 2020

В ферромагнитных материалах магнитные моменты атомов направлены параллельно друг другу, если температура меньше критической ¹. В связи с этим в твердом теле образуются области – домены с большими спонтанными магнитными моментами. Благодаря этому ферромагнитные пленки находят большое применение в микроэлектронике и вычислительных устройствах в роли магнитных носителей в устройствах для хранения и записи информации.



Железо, никель и кобальт – типичные примеры ферромагнетиков. Изучение таких металлов дает возможность получить важные данные о магнитных свойствах ферромагнитных материалах, расширить знания во многих областях, связанных с магнетизмом.

¹Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Квантово-статистическая теория твердых тел: учебное пособие. Омск. 2014. 492с.

Цели и задачи

Целью данной работы является проведение расчетов с помощью пакета SPRKKR:

- равновесных значений постоянной кристаллической решетки (ГЦК, ОЦК, ПК) Fe, Co, Ni
- спинового и орбитального магнитных моментов
- обменных интегралов при рассчитанных равновесных значениях постоянной кристаллической решётки из условий минимума полной энергии

Программный комплекс SPRKKR (спин-поляризованный релятивистский метод Корринги-Кона-Ростокера)² дает возможность выполнить неэмпирические расчеты электронной структуры трехмерных периодически упорядоченных систем в рамках теории функционала плотности. Основан на методе Корринги-Кона-Ростокера (KKP).

В пакет SPR-KKR входят программы kkrscf, kkrngen:

- программа kkrscf проводит самосогласованные расчеты self-consistent field (SCF) потенциала и волновых функций многоэлектронной системы.
- программа kkrngen вычисляет функции Грина, которые применяются для вычисления обменного интеграла системы J_{ij}

²М.А. Загребин, В.В. Соколовский Вычисление электронных и магнитных свойств твердых тел с помощью пакета SPRKKR//Изд-во Челяб. гос. ун-та. 2018. 80 с.

Чтобы описать ферромагнитное или антиферромагнитное упорядочение в разных математических моделях применяют выражение энергии обменного взаимодействия спинов, которое предложил Дирак, в котором энергия пропорциональна скалярному произведению операторов спинов s_i и s_j :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j \quad (1)$$

где J_{ij} – обменный интеграл. Его знак определяет тип взаимодействия: $J > 0$ описывает ферромагнитное упорядочивание, а $J < 0$ – антиферромагнитное

Метод Корринги-Кона-Ростокера (ККР)

Главная суть метода ККР ³ – определить функции Грина всей системы с неизменной энергией. Для этого задается t - матрица, которая описывает рассеивания от каждого индивидуального атомного рассеивателя, охарактеризованное неперекрывающимися и пространственно ограниченными потенциалами. Совместное применение уравнения Дайсона, атомных t - матриц и структурных констант G позволяет задать так называемый оператор пути рассеяния τ_{ij} .

³Т. Huhne, C. Zecha, and H. Ebert, A spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) code for Calculating Solid State Properties: manual. Munchen, 2012. P.108

Метод Корринги-Кона-Ростокера (ККР)

Обменные константы входят в гамильтониан Гейзенберга в виде:

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j \quad (2)$$

В рамках ККР метода и теории многократного рассеяния можно вычислить параметры обменного взаимодействия между магнитными моментами, используя формулировку А.Лихтенштейна.

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \text{Im} \int^{E_F} dE \text{Trace} (t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1}) \tau_{\uparrow}^{ij} (t_{j\uparrow}^{-1} - t_{j\downarrow}^{-1}) \tau_{\downarrow}^{ij} \quad (3)$$

Полученные результаты

Таблица 1: Результаты расчетов магнитных моментов Co

		a, Å	μ_{spin}, μ_B	μ_{orb}, μ_B
Co ГЦК	PBE	3,55	1,588	0,071
	VWN	3,45	1,493	0,061
	VBH	3,45	1,482	0,060
	Exp	3,55 ⁴	1,57 ⁵	0,014
Co ПК	PBE	2,32	1,969	0,090
	VWN	2,24	1,615	0,077
	VBH	2,24	1,548	0,076

Таблица 2: Результаты расчетов магнитных моментов Fe

		a, Å	μ_{spin}, μ_B	μ_{orb}, μ_B
Fe ОЦК	PBE	2,88	2,449	0,053
	VWN	2,79	2,170	0,046
	VBH	2,78	2,110	0,046
	Exp	2,86 ⁶	2,083	0,056
Fe ПК	PBE	2,35	2,553	0,055
	VWN	2,27	2,193	0,042
	VBH	2,21	-0,001	0,000

⁴ M.Wuttig, X. Liu Ultrathin metal films. Springer, 2004

⁵ K. Iwashita, T. Oguchi, Jo Takeo Orbital and spin magnetic moments V.54.N.2.1994

⁶ Pauthenet R 1982 J. Appl. Phys. 53 8187

Таблица 3: Результаты расчетов магнитных моментов Ni

		$a, \text{Å}$	μ_{spin}, μ_B	μ_{orb}, μ_B
Ni ГЦК	PBE	3,55	0,607	0,051
	VWN	3,60	0,605	0,054
	VBH	3,46	0,534	0,039
	Exp	3,52 ⁷	0,598	0,046
Ni ПК	PBE	3,86	0,000	0,000
	MJW	3,75	0,000	0,000
	VWN	3,75	0,000	0,000
	VBH	3,74	0,000	0,000

Рассчитанные значения спинового и орбитального магнитных моментов представлены в таблицах 1, 2, 3

⁷H. P. J. Wijn Magnetic Properties of Metals. Springer: Berlin. 1991. P. 190

Полученные результаты

Таблица 4: Результаты расчетов обменных интегралов

Металл	Приближение	Теория среднего поля			Теория Гейзенберга		
		J_0 , эВ	J_0 , 10^{-12} эрг	T_c , К	J_1 , эВ	J_1 , 10^{-12} эрг	T_c , К
Co ГЦК	PBE	0,193	0,308	1489,3	0,013	0,022	1519,9
Co ПК	PBE	0,219	0,350	1691,0	0,038	0,061	2074,6
Fe ОЦК	PBE	0,191	0,306	1476,4	0,018	0,029	1247,3
	MJW	0,171	0,274	1320,9	0,019	0,031	1085,3
	VWN	0,170	0,272	1314,2	0,019	0,031	1088,6
	VBH	0,163	0,261	1258,4	0,018	0,029	1091,6
Fe ПК	PBE	0,044	0,071	343,3	0,010	0,017	153,1
	MJW	0,015	0,024	114,5	0,012	0,019	164,2
	VWN	0,010	0,016	76,6	0,011	0,018	164,9
	VBH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Ni ГЦК	PBE	0,047	0,075	363,2	0,003	0,004	355,8
	MJW	0,042	0,067	324,1	0,002	0,004	324,4
	VWN	0,043	0,069	331,7	0,002	0,004	323,4
	VBH	0,036	0,058	279,1	0,002	0,003	284,2
Ni ПК	PBE	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	MJW	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	VWN	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	VBH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Полученные результаты

На рисунке 1 изображена зависимость параметров обменного взаимодействия J_{ij} от расстояния между атомами R/a .

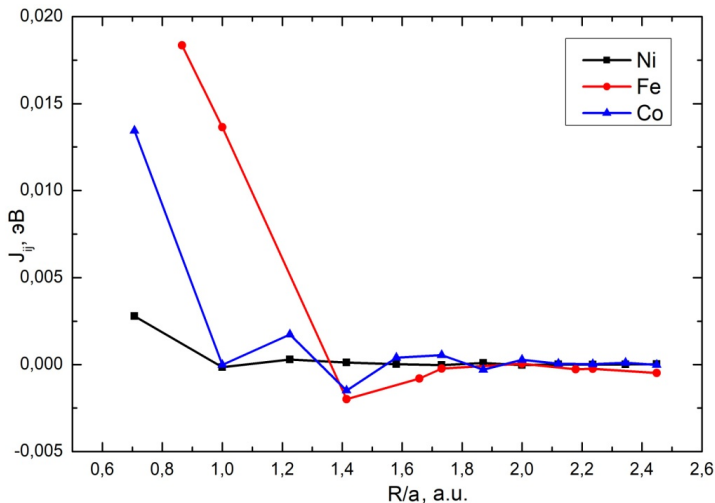


Рис. 1: Зависимость значений обменных интегралов J_{ij} от расстояния R/a

Полученные результаты

По результатам расчетов, проведенных в данной работе, можно сделать следующие выводы:

- Для всех металлов обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер.
- Самое большое значение критической температуры T_c у Co.
- Значения констант обменного взаимодействия у Co, Fe, Ni в теории Гейзенберга меньше, чем в теории среднего поля.
- В простой кубической решетке Ni является немагнитным.
- Постоянные обменного взаимодействия J_{ij} практически не меняются с увеличением расстояния R/a .

Спасибо за внимание!