

РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ
В ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

С.М. Дунаевский

1. Среди магнитных оксидов переходных металлов особое место занимают ферримагнетики со структурой шпинели (56 атомов в элементарной ячейке) и граната (160 атомов в элементарной ячейке).

В данной работе выполнен расчет энергий магнитных возбуждений («spin-flip») в магнитных оксидах переходных металлов со структурой шпинели и граната, исходя из самосогласованных спин-поляризованных локальных плотностей электронных состояний ферритов, впервые полученных методом рекурсий. На основе вычисленных значений ΔE_{sf} оценены параметры Гейзенберга J_{ij} и температуры Кюри (Нееля) феррита $\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ и железо-иттриевого граната (ЖИГ) $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

2. Численные расчеты электронной структуры ферритов выполнялись в рамках кластерного рекурсионного метода [1]. В качестве объектов расчета были выбраны литиевый феррит $\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ и железо-иттриевый гранат (ЖИГ) $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, представляющие наибольший интерес для исследователей. Расчет локальных плотностей состояний таких соединений требует рассмотрения больших кластеров, что эффективно может быть сделано лишь в рамках метода рекурсий.

Достаточно подробно методика спин-поляризованного самосогласованного расчета электронной структуры различных магнитных конфигураций описана в работе автора [2].

Для получения правильного поведения $n_{i\sigma}(\varepsilon)$ вблизи краев зон, а также для ослабления зависимости плотности состояний от размера кластера численные расчеты $n_{i\sigma}(\varepsilon)$ выполнялись с использованием терминатора, моделирующего отброшенную часть непрерывной дроби для функции Грина $G_0(\varepsilon)$. Расчет локальных плотностей состояний $n_{i\sigma}(\varepsilon)$, чисел заполнения $N_{i\sigma}$, зарядовых состояний и атомных магнитных моментов m_i выполнялся для антиферромагнитной (АФ), ферромагнитной (ФМ) и ряда смежных конфигураций. Во всех случаях устойчивой оказывалась АФ конфигурация. Ферромагнитное состояние существовало лишь тогда, когда с самого начала для всех атомов в расчет закладывалось одно и то же значение спинового расщепления подзон Δ_σ . При задании на начальном этапе самосогласования параметра Δ_σ только в октаэдрической подрешетке в результате самосогласования возникало АФ упорядочение окта- и тетраэдрических подрешеток, т.е. знак Δ у катионов в тетраэдрах оказывался обратным знаком Δ на ионах железа в октаэдрах. Поэтому в данном подходе нельзя получить устойчивое состояние с одним инвертированным спином в АФ окружении. Спин удастся перевернуть только из ФМ конфигурации.

Самосогласованные значения спиновых расщеплений электронных подзон и атомных магнитных моментов $m_i(\mu_B)$ для АФ конфигураций $\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ и $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ представлены в табл. 1,2.

Таблица 1

Самосогласованные значения атомных магнитных моментов m_i (μ_B) и спиновых расщеплений подзон Δ_i (eV) АФ конфигурации $\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$

	Fe (тетр.)	Fe (окт.)	O
m_i	-4.39	4.75	0.01
Δ_i	8.53	9.23	-

Таблица 2

Результаты расчета АФ конфигурации $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

	Fe (тетр.)	Fe (окт.)	O	Y
m_i	-4.582	4.43	0.02	-
Δ_i	8.1	8.3	-	-

Таблица 3

Теоретические и экспериментальные значения ΔE_{sf} объемных параметров J_{AB} и T_c двухподрешеточных ферримагнетиков

	ΔE_{sf} , eV	J_{AB} , К		T_c , К	
		теория	[3,4]	теория	[3,4]
$\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$	0.92	60	29	1800	950
$\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$	0.324	31	37.1	600	545

3. Энергия ΔE_{sf} двухподрешеточных ферримагнетиков в работе вычислялась как разность полных энергий кластера в возбужденном и основном состояниях. Основное состояние рассмотренных систем реализуется в АФ конфигурации. В качестве возбужденного состояния рассматривалась ФМ конфигурация. При этом изменялось только междодрешеточное взаимодействие А-В, а А-А и В-В взаимодействия оставались без изменения. Таким образом,

$$\Delta E_{sf} = E^{\text{FM}} - E^{\text{AF}}. \quad (1)$$

Полная энергия системы E представлялась в виде, который следует из простейшего рассмотрения модели Хаббарда

$$E = \int \varepsilon n(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{1}{4} \sum_i \Delta_i m_i. \quad (2)$$

Результаты численного расчета убедительно свидетельствуют о том, что основной вклад в ΔE_{sf} вносит изменение кинетической энергии системы.

Из (1) можно найти ΔE_{sf} и сопоставить с ней изменение энергии, полученное в модели Гейзенберга. Тогда [3]

$$\Delta E_{sf} = 4|S_A||S_B|J_{AB} \left(\frac{X_A Z_{AB} + X_B Z_{AB}}{X_A + X_B} \right), \quad (3)$$

где $X_{A,B}$ — число атомов данного типа в формульной единице ($X_A = 1$, $X_B = 1.5$), $Z_{AB(BA)}$ — число ближайших соседей типа B(A) для катиона A(B).

Для $Li_{0.5}Fe_{2.5}O_4$ $Z_{AB} = 9$, $Z_{BA} = 6$; для $Y_3Fe_5O_{12}$ $Z_{AB} = 6$, $Z_{BA} = 4$. Из (3) легко определить знак и величину J_{AB} .

В предположении о доминирующей роли межподрешеточного обмена можно оценить температуру Кюри ферромагнетика T_c [3]

$$T_c \cong \Delta E_{sf}/6. \quad (4)$$

В табл. 3 вычисленные значения J_{AB} и T_c сравниваются экспериментальными данными.

Список литературы

- [1] Haydock R. // Sol. Stat. Phys. 1980. V. 35. N 1. P. 216–295.
- [2] Дунаевский С.М., Савельев А.П. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 209–213.
- [3] Крупичка С. // Физика ферритов. М.: Мир, 1976. С. 452.
- [4] Nakao K., Gato T., Miura N. // Techn. Rep. ISSP (A). 1988. N 1986.

НИИ «Домен»
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
28 сентября 1993 г.

УДК 537.226.:537.311.322

© Физика твердого тела, том 36, № 4, 1994
Solid State Physics, vol. 36, N 4, 1994

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКИ НА СОСТОЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ LiF

М.А.Беззубов, П.Д.Алексеев

Проблема достоверной идентификации структурных дефектов в щелочно-галоидных кристаллах (ШГК) по-прежнему остается актуальной. Наряду с другими методами (ЭПР, ТСЛ, ИК- и УФ-спектроскопия) метод диэлектрической спектроскопии представляется достаточно точным и надежным для изучения миграционных и релаксационных механизмов в ШГК. Анализ температурных зависимостей диэлектрических параметров дает информацию, позволяющую судить о природе носителей заряда, структуре дефектов и их распределении. Среди легирующих добавок, существенно меняющих свойства ШГК, важное место принадлежит молекулярным ионам OH^- и ионам двухвалентного металла Me^{2+} , встраивающимся соответственно в анионную и катионную подрешетки кристалла.

В настоящей работе сделана попытка установить связи диэлектрических свойств монокристаллов фтористого лития с присутствием в кристалле примесей. Использование различных режимов температурной обработки позволило сделать выводы о структуре и распределении дефектов.