

УДК 538.91:004.942

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В АМОРФНЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Re–Gd

© 2019 г. А. В. Бондарев¹, *, И. М. Пашуева¹, В. В. Ожерельев¹, И. Л. Батаронов¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Воронежский государственный технический университет”, Воронеж, Россия

*E-mail: bondarev_a_v@mail.ru

Поступила в редакцию 07.09.2018 г.

После доработки 31.01.2019 г.

Принята к публикации 27.03.2019 г.

Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследованы магнитные свойства моделей аморфных сплавов системы Re–Gd. Рассчитаны температурные зависимости спонтанной намагниченности, магнитной восприимчивости, параметра порядка Эдвардса–Андерсона. Построена зависимость температуры перехода в состояние спинового стекла от концентрации атомов гадолиния. Переход в состояние спинового стекла в аморфных сплавах Re–Gd имеет место только выше порога протекания в данной системе.

DOI: 10.1134/S0367676519070081

ВВЕДЕНИЕ

Аморфные сплавы (АС) на основе редкоземельных металлов (РЗМ) вызывают большой интерес благодаря уникальному сочетанию их физических свойств [1–3]. В настоящее время одним из наименее изученных остается вопрос о магнитном состоянии этих материалов. Конкуренция обменных взаимодействий разного знака и случайная анизотропия приводит к возникновению разнообразных неколлинеарных магнитных структур в АС на основе РЗМ, в частности, к переходу в состояние спинового стекла.

Природа состояния спиновых стекол на микроскопическом уровне недостаточно изучена, что вызывает необходимость построения компьютерных моделей магнитных свойств этих материалов. Наиболее эффективным для этих целей является метод Монте-Карло (МК) [4].

В данной работе методом МК исследованы магнитные свойства АС Re–Gd, которые являются типичным представителем магнетиков с конкуренцией обменных взаимодействий разного знака. Экспериментально установлено [5], что в данной системе имеет место пик на температурной зависимости магнитной восприимчивости и необратимость намагниченности, свидетельствующие о переходе из парамагнитного состояния в фазу спинового стекла.

1. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Методом молекулярной динамики при $T = 100$ К построены модели атомной структуры аморфных сплавов $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 4, 5, 7, 8, 10, 12, 37, 61$ и 93 ат. %). Число атомов в каждой модели равнялось 100 000. Методом Монте-Карло, реализованном в виде стандартного алгоритма Метрополиса, в рамках модели Гейзенберга исследованы магнитные свойства построенных моделей.

В качестве приближения к осциллирующему РККИ-взаимодействию между магнитными моментами атомов Gd выбрана следующая модель [6]: в пределах первой координационной сферы спины взаимодействуют ферромагнитно, в пределах второй координационной сферы – антиферромагнитно, в результате чего в системе возникает конкуренция обменных взаимодействий разного знака, приводящая к возникновению состояния спинового стекла. Таким образом, гамильтониан, описывающий взаимодействие магнитных моментов атомов гадолиния, был записан в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_2 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k) - \mu h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

где $J_1 > 0$ – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми не

превышает r_1^{min} – положения первого минимума парциальной парной функции радиального распределения атомов; $g_{Gd-Gd}(r)$; $J_2 < 0$ – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми находится в интервале между r_1^{min} и r_2^{min} – первым и вторым минимумами парциальной парной функции распределения $g_{Gd-Gd}(r)$; $\mu = 7.98\mu_B$ – эффективный магнитный момент атома Gd; h – напряженность внешнего магнитного поля.

Значение интеграла обменного взаимодействия в первой координационной сфере было выбрано равным $J = 45.7$ К так, чтобы температуры магнитных фазовых переходов в модели были близки к экспериментальным. Отношение интегралов обменного взаимодействия в первой и второй координационных сферах $J_1/|J_2|$ было принято равным 10.

Проводилось охлаждение моделей из парамагнитного состояния в интервале температур $T = 100-1$ К с шагами $\Delta T = 2$ и 5 К. В процессе охлаждения рассчитывались температурные зависимости потенциальной энергии системы (1), намагниченности $M(T)$, параметра порядка Эдвардса–Андерсона $q(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ по методике, описанной в [6].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Проведено моделирование магнитных свойств АС $Re_{100-x}Gd_x$ ($x = 4, 5, 7, 8, 10, 12, 37, 61$ и 93 ат. %). Во всех моделях АС $Re_{100-x}Gd_x$ при $x > 7$ ат. % наблюдается переход из парамагнитного состояния в состояние спинового стекла. Сплавы с содержанием гадолиния $x = 4, 5$ и 7 ат. % при всех температурах вплоть до $T = 1$ К остаются в парамагнитной фазе.

При охлаждении моделей в диапазоне температур $T = 100-1$ К спонтанная намагниченность не превышает величины $0/03M_S$, где M_S – намагниченность насыщения.

На рис. 1 (а, б) приведены температурные зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ для всех исследованных составов АС $Re_{100-x}Gd_x$. Значения восприимчивости при каждой температуре усреднялись по 10 циклам, каждый из которых состоял из 10^3 МК-шагов/спин. При $x > 7$ ат. % Gd на всех кривых $\chi(T)$ наблюдаются четко выраженные максимумы, по положению которых определялись температуры спин-стекольного фазового перехода T_f . При $x \leq 7$ ат. % Gd максимум на кривых $\chi(T)$ исчезает, и магнитная восприимчивость монотонно возрастает при понижении

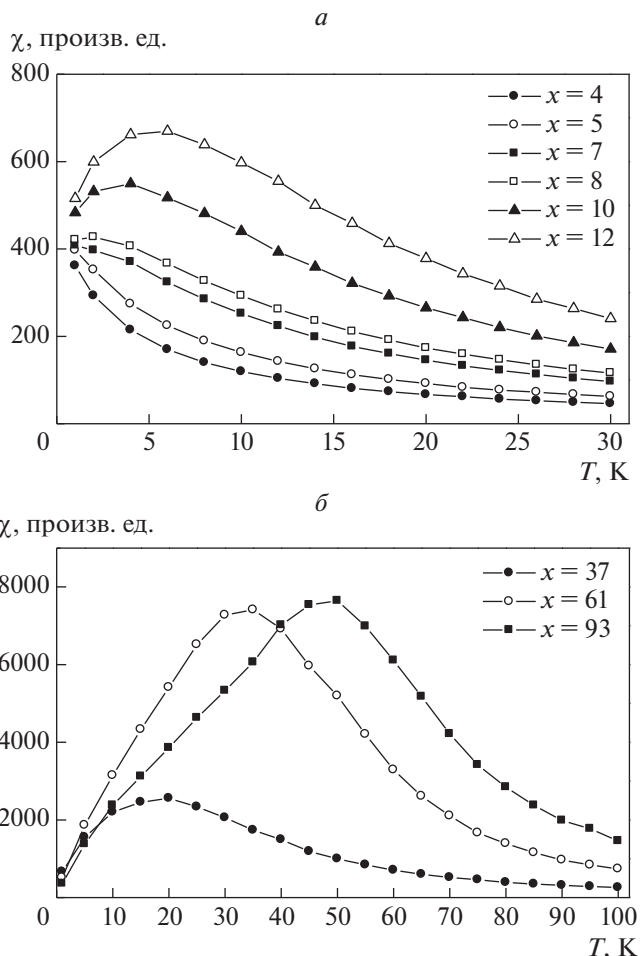


Рис 1. Температурная зависимость магнитной восприимчивости для моделей АС $Re_{100-x}Gd_x$: а – $x = 4, 5, 7, 10$ и 12 ат. %, б – $x = 37, 61$ и 93 ат. %.

температуры, что характерно для парамагнитного состояния.

Ранее нами было установлено, что порог протекания в данной системе составляет 4 ат. % Gd [7]. При $x > 4$ ат. % Gd в системе возникает перколяционный кластер из атомов Gd, находящихся на расстояниях друг от друга, не превышающих радиуса второй координационной сферы. Таким образом, переход в состояние спинового стекла в АС $Re_{100-x}Gd_x$ имеет место только выше порога протекания в данной системе, т.е. при $x > 7$ ат. % Gd.

На рис. 2 приведена зависимость температуры перехода парамагнетик – спиновое стекло T_f от концентрации атомов гадолиния в сплаве (магнитная фазовая диаграмма АС Re–Gd) в сравнении с экспериментальными данными [5]. Погрешность определения температуры T_f обусловлена величиной шага изменения температуры при расчете зависимости $\chi(T)$: для $x = 4-12$ ат. % Gd погрешность

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследованы магнитные свойства моделей АС системы Re–Gd в широком диапазоне концентраций. Рассчитаны температурные зависимости спонтанной намагниченности, магнитной восприимчивости, параметра порядка Эдвардса–Андерсона. Построена зависимость температуры перехода в состояние спинового стекла от концентрации атомов гадолиния, хорошо согласующаяся с экспериментальными данными. Установлено, что переход в состояние спинового стекла в АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ имеет место только выше порога протекания в данной системе, т.е. при $x > 7$ ат. % Gd.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андреев А.С., Никитин С.А. // УФН. 1997. Т. 167. № 6. С. 605.
2. Chudnovsky E.M. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64. № 10. P. 5770.
3. Boucher B., Chieux P. // J. Phys. Cond. Matt. 1991. V. 3. № 14. P. 2207.
4. Биндер К., Хеерман Д.В., Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 144 с.
5. Бармин Ю.В., Балалаев С.Ю., Бондарев А.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2006. Т. 70. № 8. С. 1145; *Barm-in Yu.V., Balalaev S.Yu., Bondarev A.V. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2006. V. 70. № 8. P. 1308.
6. Бондарев А.В., Ожерельев В.В., Батаронов И.Л. // Изв. РАН. Сер. физ. 2010. Т. 74. № 10. С. 1534; *Bondarev A.V., Ozherelyev V.V., Bataronov I.L.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2010. V. 74. № 10. P. 1474.
7. Бондарев А.В., Бармин Ю.В., Батаронов И.Л. // Матер. XVI Междунар. семинара “Физико-матем. моделирование систем”. (Воронеж, 2016). С. 29.

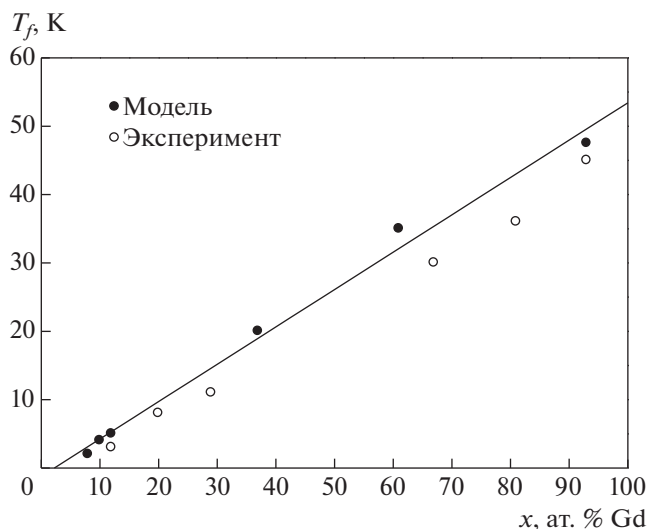


Рис. 2. Зависимость температуры перехода в состояние спинового стекла для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ от концентрации атомов гадолиния.

составляет 2 К, для $x = 37-93$ ат. % Gd – 5 К. Зависимость $T_f(x)$ линейная и для большей части концентрационного интервала хорошо согласуется с экспериментальными данными [5].

Также были рассчитаны температурные зависимости параметра порядка Эдвардса–Андерсона $q(T)$ для АС Re–Gd. При понижении температуры величина $q(T)$ монотонно возрастает, достигая наибольшего значения при $T = 1$ К. Таким образом, переход в состояние спинового стекла в АС Re–Gd хорошо описывается параметром порядка Эдвардса–Андерсона.