

УДК 530.17: 537.9+544.15

К ВОПРОСУ О РАСЧЕТЕ КРИТЕРИЯ ПОДОБИЯ K_{me} ФЕРРОМАГНИТНЫХ И СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

В.Н. Макаров

Введен математический критерий подобия K_{me} , как отношение обменного к кулоновскому взаимодействию для элементарной ячейки. Рассмотрен принцип его нахождения без учета количественных характеристик обменного и кулоновского взаимодействия.

Ключевые слова: критерий подобия; ферромагнетик; сегнетоэлектрик; элементарная ячейка.

REVISITING ESTIMATION OF ANALOGY PARAMETER K_{me} FOR FERROMAGNETIC AND FERROELECTRIC CRYSTAL PROPERTIES

V.N. Makarov

It is entered the mathematical analogy parameter K_{me} as the relation exchange to Coulomb interaction for the unit cell. It is considered the principle of its stay without quantitative characteristics of exchange and Coulomb interaction.

Keywords: analogy parameter; ferromagnetic; ferroelectric; unit cell.

В работе предлагается метод определения преобладания ферромагнитных или сегнетоэлектрических свойств кристаллов на основе анализа параметров их элементарных ячеек и химических составов. Такая идентификация ферромагнитных и сегнетоэлектрических свойств кристаллов представляет несомненный интерес, так как не требует воздействия магнитных и электрических полей на исследуемый материал.

Формирование магнитных свойств у ферромагнетиков обусловлено обменным взаимодействием, связанным с полным спином системы. Обменное взаимодействие отражает зависимость энергии систем электронов от величины их результирующего спинового магнитного момента. Возникновение магнитной структуры, в том числе ферромагнитной, связано в основном с обменным взаимодействием атомов, которое не зависит от направления суммарного магнитного момента относительно решетки [1, 2].

Кроме обменного взаимодействия в ферромагнетиках можно зафиксировать взаимодействия между атомными магнитными моментами, магнитных моментов атомов с электрическим полем кристаллической решетки и орбитальное взаимодействие. Однако данные взаимодействия являются

слабыми по сравнению с обменным, поэтому их можно не учитывать [2].

Сегнетоэлектрики относятся к классу поляризуемых кристаллов, у которых в отсутствие внешнего электрического поля в определенном интервале температур и давлений существует спонтанная электрическая поляризация. Данное явление обусловлено кулоновским взаимодействием [3].

Для оценки соотношения ферромагнитных и сегнетоэлектрических свойств в кристалле необходимо определить для него базовые ферромагнетик и сегнетоэлектрик: материалы с электрическими и магнитными свойствами, у которых одинаковый тип кристаллической решетки. Относительно базовых сегнетоэлектрика и ферромагнетика будет анализироваться кристалл с такой же кристаллической решеткой. Условие принадлежности к одному структурному типу необходимо для обеспечения математического подобия исследуемых систем.

Сегнетоэлектрики и ферромагнетики имеют ряд схожих свойств. Они в макроскопических объемах обладают спонтанной поляризацией (ферромагнетик – магнитной, сегнетоэлектрик – электрической). Исчезает эта поляризация при изменении температуры и фазового перехода второ-

го рода. Однако у сегнетоэлектриков могут быть фазовые переходы первого рода. Сегнетоэлектрические и ферромагнитные кристаллы самопроизвольно “разбиваются” на отдельные области (домены), отличающиеся направлением спонтанной поляризации и полного спина, соответственно. В сегнетоэлектриках и ферромагнетиках можно зафиксировать сегнетоэлектрический и магнитный гистерезис, соответственно. Описание схожих и различных параметров сегнетоэлектриков и ферромагнетиков было представлено в [2, 4, 5].

В сегнетоэлектриках взаимодействие ионов в кристаллической решетке анизотропно, поэтому вектор спонтанной поляризации прочно связан с определенными направлениями в кристалле. Возникновение магнитной структуры в ферромагнетике связано, в основном, с обменным взаимодействием, которое не зависит от направления суммарного магнитного момента относительно решетки. На основании этого различия сравнение свойств ферромагнетика и сегнетоэлектрика необходимо проводить по кулоновскому и обменному взаимодействию, а не по спонтанной намагниченности и спонтанной поляризации.

Преобладание одного вида взаимодействия над другим можно вычислить по их отношению энергий взаимодействия.

Отношение обменного взаимодействия, обеспечивающего возникновение спонтанной намагниченности, к кулоновской энергии, обеспечивающей спонтанную поляризацию, является математическим критерием подобия:

$$Kme = \frac{U}{W},$$

где Kme – отношение типов взаимодействий в элементарной ячейке; U – энергия обменного взаимодействия; W – энергия кулоновского взаимодействия.

Энергия кулоновского взаимодействия для элементарной решетки равна [6]:

$$W = \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K e^2}{R_{JK}} + \sum_{i < k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}},$$

где R_{JK} , r_{ik} и r_{ij} – расстояние между соответствующими ядрами и электронами; Z_J и Z_K – атомный номер J-го и K-го ядра; e – элементарный заряд.

Необходимые значения для расчета энергии кулоновского взаимодействия находят из параметров элементарной ячейки (a , b , c и α , β , γ) и химических характеристик элементов, составляющих кристалл.

Энергия обменного взаимодействия для элементарной кристаллической решетки равна [7]:

$$U = -2I \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1},$$

где I – обменный интеграл; S_i – спин электрона в узле кристаллической решетки с номером i .

Значения обменного интеграла находят, используя значения точки Кюри для ферромагнетика [7]. Определение обменных интегралов описано в [8–11]. Вопрос нахождения обменного взаимодействия для сегнетоэлектриков остается открытым.

После расчета критерия подобия для базовых сегнетоэлектрика и ферромагнетика, можно найти значение этого критерия для исследуемого материала, зная тип его элементарной ячейки и химический состав.

Анализируя значения критериев, можно получить следующие результаты:

1. $Kme_\phi \approx Kme_n > Kme_c$.
2. $Kme_\phi > Kme_n \approx Kme_c$.
3. $Kme_\phi > Kme_n > Kme_c$,

где Kme_ϕ – математический критерий подобия базового ферромагнетика; Kme_c – математический критерий подобия базового сегнетоэлектрика; Kme_n – математический критерий подобия неизвестного материала.

В первом случае критерий подобия для исследуемого материала близок к критерию подобия базового ферромагнетика. Можно сделать вывод, что исследуемый материал обладает ферромагнитными свойствами. Второй результат показывает, что критерий подобия исследуемого материала близок к критерию базового сегнетоэлектрика. Следовательно, исследуемый материал обладает свойствами сегнетоэлектрика. В третьем варианте значение критерия подобия для исследуемого материала лежит между значениями критериев для базовых ферромагнетика и сегнетоэлектрика. В этом случае необходим более точный анализ.

Если критерий подобия исследуемого материала выходит за рамки критериев базовых ферромагнетика и сегнетоэлектрика (т. е. больше критерия Kme_ϕ или меньше критерия Kme_c), он обладает свойствами магнитных и электрических кристаллов, соответственно. Более точный результат может быть получен при дополнительных исследованиях.

Предполагается провести расчет для кристаллов с тетрагональной решеткой, средней категории симметрии, поскольку такой тип кристаллической решетки могут иметь, например, сегнетоэлектрик BaTiO_3 и ферромагнетик Au_4Mn . Параметры кристаллической решетки для сегнетоэлектрика BaTiO_3 имеются в [5], а для ферромагнетика Au_4Mn – в [12, 13].

Литература

1. *Вонсовский С.В.* Магнетизм / С.В. Вонсовский. М.: Наука, 1971. 1032 с.
2. *Ландау Л.Д.* Электродинамика сплошных сред. Том VIII / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Наука, 1982. 620 с.
3. *Смоленский Г.А.* (ред.) Физика сегнетоэлектрических явлений / Г.А. Смоленский. Л.: Наука, 1985. 393 с.
4. *Иона Ф.* Сегнетоэлектрические кристаллы / Ф. Иона, Д. Ширане; пер. с англ. Л.А. Фейгина и Б.К. Севастьянова; под ред. Л.А. Шувалова. М.: Мир, 1965. 555 с.
5. *Physics of Ferroelectrics. A Modern Perspective* / K. Rabe, Ch.H. Ahn, J.-M. Triscone (Eds.). New York: PACS, 2007. 383 p.
6. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников / А.И. Ансельм. М.: Госуд. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1962. 418 с.
7. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель; пер. с англ. А.А. Гусева и А.В. Пахнева; под общ. ред. А.А. Гусева. М.: Наука, 1978. 791 с.
8. *Rushbrooke G.S.* On the Curie points and high temperature susceptibilities of Heisenberg model ferromagnetics / G.S. Rushbrooke, P.J. Wood // *Molecular Physics: An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics*. 1958. P. 257–283.
9. *Орленко Ф.Е.* Векторная модель Гейзенберга-Дирака-ван-Флека для одномерной антиферромагнитной цепочки локальных $S = 1$ спинов / Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря, Е.В. Орленко // *Ж. техн. физики*. 2012. Том 82. Вып. 2. С. 10–16.
10. *Смирнов Д.С.* Влияние обменного взаимодействия на спиновые флуктуации локализованных электронов / Д.С. Смирнов, М.М. Глазов, Е.Л. Ивченко // *Физика твердого тела*. 2014. Том 56. Вып. 2. С. 254–262.
11. *Rakitin Yu. V.* Magnetic and Thermodynamic Properties of Heisenberg Chains and n -Nuclear Cyclic Clusters: Si = 5/2, Si = 3, and Si = 7/2 Systems / Yu.V. Rakitin, O.R. Starodub, V.M. Rakitina, V.T. Kalinnikov, V.M. Novotortsev // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2007. Vol. 52. No. 3. P. 398–404.
12. *Hirone T.* The Change of Curie Temperature of Ordered Au₄Mn and of Indium Heusler Alloy by Hydrostatic Pressure / T. Hirone, T. Kaneko, K. Kondo // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1962. Vol. 18. No 1. P. 65–69.
13. *Watanabe D.* The crystal structure of the ordered alloy Au₄Mn / D. Watanabe // *Acta Crystallographica*. 1957. Vol.10. Part 7. P. 483–485.