

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СПИНОВОЙ СИСТЕМЕ ЯДЕР АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ ПРИ АДИАБАТИЧЕСКОМ РАЗМАГНИЧИВАНИИ

С.И.Васильев, Л.А.Калмыкова, И.А.Меркулов

Приведены результаты расчета температуры фазового перехода (T_c), вида основного состояния ядерной спин-системы GaAs и процесса адиабатического размагничивания этой системы в область значений температуры, меньших T_c .

При сверхнизких температурах $T \approx 10^7 \div 10^8$ К взаимодействие между ядерными спинами в твердом теле приводит к их упорядочению¹. Такие температуры достигаются адиабатическим размагничиванием сильно поляризованной ядерной спин-системы. Теория адиабатического размагничивания развита в высокотемпературном приближении². В этом приближении поляризация ядер в исходном состоянии заведомо недостаточна для получения после адиабатического размагничивания упорядоченного спинового состояния.

Таким образом, существующие аналитические методы не позволяют определить минимальное значение поляризации в сильном поле, начиная с которого адиабатическое размагничивание приведет к самопроизвольному упорядочению спинов. В тоже время значение этой поляризации желательно знать до постановки эксперимента. В таких условиях большое значение приобретает численное моделирование процесса адиабатического размагничивания на ЭВМ.

В качестве объекта исследования был выбран GaAs, где значительную ядерную поляризацию в поле порядка нескольких десятков эрстед удается получить в условиях оптической ориентации³. Предельное значение поляризации в этих экспериментах может достигать 70%⁴. Расчет проводился для ячейки Монте-Карло, состоящей из 96 ядер Ga^{69} и 96 ядер As^{75} (магнитные моменты $\mu_{As} \approx 1,4 \mu_N$, $\mu_{Ga} = 2,0 \mu_N$, где μ_N – ядерный магнетон) с периодическими граничными условиями. Фактически моделировалась ситуация, когда весь объем макроскопического кристалла разбит на равные части, содержащие 192 ядра (ячейки Монте-Карло) и имеющие одинаковые состояния спиновой поляризации ядер. Учитывалось только магнитодипольное взаимодействие между ядерными спинами, причем спины ядер считались классическими. Предполагалось, что макроскопический кристалл имеет кубическую форму.

Не вдаваясь в детали вычислительной процедуры, отметим, что расчеты проводились в два этапа. На первом моделировалось состояние ядерной спиновой системы, помещенной в термостат, имеющий некую температуру T . Внешнее магнитное поле здесь считалось равным

нулю. Схема расчета этого состояния фактически аналогична методике работы ⁵. На втором этапе взаимодействие с термостатом выключалось и поле H медленно увеличивалось до значения $H_{max} \approx 4,5 \text{ Э}$. Тем самым моделировалось адиабатическое намагничивание системы. Для контроля адиабатичности процесса выполнялось последующее размагничивание в нулевое внешнее поле. Скорость изменения \dot{H} выбиралась столь малой, что изменение температуры после цикла намагничивание-размагничивание не превосходило $5 \cdot 10^{-9} \text{ К}$.

Основные результаты, полученные в ходе численного эксперимента сводятся к следующему.

1. В основном состоянии системы, соответствующем $T=0$, ядерные спины упорядочены антиферромагнитным образом в каждой подрешетке (Ga и As). Все спины параллельны или антипараллельны оси $[111]$. При этом для ядер одного сорта лежащих в одной плоскости $(11\bar{2})$ спины параллельны, а для соседних плоскостей – антипараллельны. Подрешетка As получается из подрешетки Ga сдвигом на вектор $(-1/4, 1/4, 1/4)$.

2. Зависимость средней энергии одного ядерного спина от температуры T представлена на рис.1 (кривая 1). Для значений $T \gtrsim 8 \cdot 10^{-8} \text{ К}$ эта зависимость хорошо аппроксимируется высокотемпературной формулой $E \approx (\bar{\mu}^2 H_L^2) / (3T)$, где $H_L^2 \approx 2,0 \text{ Э}^2$ – среднее значение квадрата локального поля, действующего на ядерный спин со стороны соседних ядер, а $\bar{\mu} = 1,7 \mu_N$ – среднее значение ядерного магнитного момента. Для $T < 5 \cdot 10^{-8} \text{ К}$ высокотемпературное приближение не работает. В районе значений $T \approx (5 \pm 2) \cdot 10^{-8} \text{ К}$ теплоемкость системы максимальна. Однако недостаточная точность в определении средней энергии ($\sim 8\%$) не позволяет найти точное значение температуры фазового перехода по разрыву производной dc/dT .

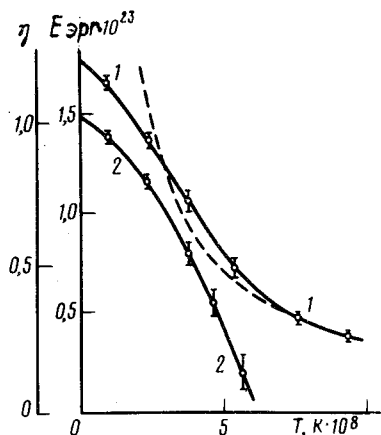


Рис. 1

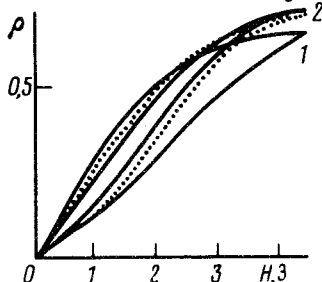


Рис. 2

Рис.1. Зависимость средней энергии одного ядерного спина (1) и параметра (2) от температуры. Пунктир – расчет по высокотемпературной формуле

Рис.2. Циклы намагничивания ядерной спиновой системы в отсутствие теплообмена с термостатом

На этом же рисунке представлена зависимость от температуры амплитуды максимальной фурье-компоненты пространственного распределения ядерной спиновой поляризации (параметра порядка). Эта амплитуда имеет наибольшее значение при $T=0$ и становится пренебрежимо малой для $T > 6 \cdot 10^{-8} \text{ К}$. Это позволяет дать более точную оценку температуры фазового перехода $6 \cdot 10^{-8} \text{ К} > T_c > 5 \cdot 10^{-8} \text{ К}$. Заметим, что расчет в рамках модели поля Вейсса дает значение $T_c \approx 6 \cdot 10^{-8} \text{ К}$.

3. Результаты расчета процессов адиабатического намагничивания и размагничивания приведены на рис.2, 3. На рис. 2 представлена зависимость среднего ядерного спина от величины магнитного поля в цикле $0 \rightarrow H_{max} \rightarrow 0$ для исходной температуры $T = 4 \cdot 10^{-8} \text{ К}$. Скорости изменения магнитного поля (\dot{H}) в циклах 1, 2, 3, относятся как 5:2,5:1. Видно, что по мере уменьшения \dot{H} ветви намагничивания ($0 \rightarrow H_{max}$) и размагничивания ($H_{max} \rightarrow 0$) сближаются, что соответствует уменьшению необратимых потерь энергии, идущих на нагрев ядерной спин-системы. В цикле 3 увеличение средней энергии составляло $\approx 7\%$. Другими словами после намагничивания и размагничивания температура системы увеличилась не более чем на $0,5 \cdot 10^{-8} \text{ К}$. Принимая

во внимание погрешность в расчете зависимости E от T такую скорость изменения H можно считать достаточной для моделирования адиабатического процесса.

На рис.3 представлена зависимость температуры системы после адиабатического размагничивания (из поля $H_{max} \approx 4,5$ Э) от исходной поляризации ρ ядерных спинов. Для $\rho < 0,45$ кривая $T(\rho)$ хорошо аппроксимируется высокотемпературной формулой

$$T = \frac{\bar{\mu} H_{max}}{3\rho} \sqrt{\frac{H_L^2}{H_{max}^2 + H_L^2}} \quad (1)$$

В районе $\rho \approx 0,5$ ($T \approx 5,5 \cdot 10^8$ К $\approx T_c$) на расчетной зависимости наблюдается перегиб, который естественно связать с переходом размагниченной системы в упорядоченное состояние. С этого значения ρ количественные расхождения между рассчитанной зависимостью $T(\rho)$ и высокотемпературной формулой быстро возрастают и для $\rho > 0,8$ (1) не годится даже для грубых оценок. Удивительным является то обстоятельство, что (1) неплохо описывает $T(\rho)$ вплоть до температуры фазового перехода.

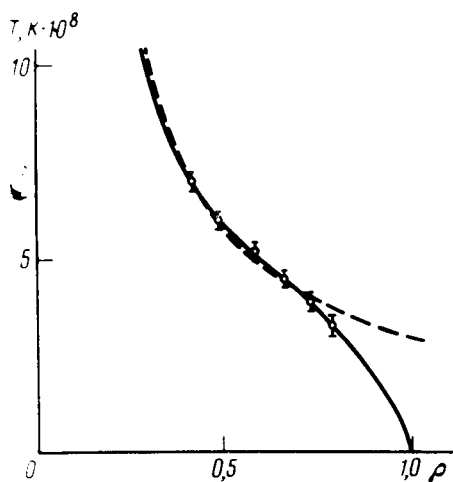


Рис.3. Зависимость температуры после размагничивания от исходной поляризации в поле $H_{max} \approx 4,5$ Э. Пунктир — высокотемпературное приближение

Исходя из полученных результатов можно сделать вывод, что сочетанием оптической ориентации и адиабатического размагничивания можно достигнуть сверхнизких температур, при которых ядерные спины упорядочиваются антиферромагнитным образом. В качестве минимальной поляризации в сильном поле можно ориентироваться на величину $\rho_{min} \approx 50\%$, что на 20% меньше теоретического предела, достигаемого при оптической ориентации.

Авторы благодарны Б.П.Захарчене за интерес к проведенным исследованиям, М.И.Дьяконову, В.М.Перелю, И.А.Фаворскому, Б.И.Шкловскому и А.Л.Эфросу за полезные обсуждения.

Литература

1. Абрагам А., Бувфард В., Голдман М., Роинел Я. Le Journ. de Phys., 1978, 38, С6-1436.
2. Гольдман М. Спиновая температура и ЯМР в твердых телах. М.: Наука, 1972.
3. Калевич В.К., Кульков В.Д., Флейшер В.Г. Письма в ЖЭТФ, 1982, 35, 17.
4. Дьяконов М.И., Перель В.И. ЖЭТФ, 1973, 65, 362.
5. Фаворский И.А., Громова Н.Б. ФТТ, 1979, 21, 3365.