

Спиновые эффекты в немагнитных кристаллах в магнитном поле

© Б.М. Даринский, В.Н. Фёклин

Воронежский государственный университет,
394693 Воронеж, Россия

(Поступила в Редакцию 18 октября 2005 г.)

Рассмотрено влияние малого внешнего магнитного поля на взаимодействие дислокации с парамагнитным центром в немагнитных кристаллах. Предложен альтернативный механизм перехода между связанным и антисвязанным состояниями валентных электронов для описания депиннинга дислокаций в таких системах. Показано, что в этом процессе существенную роль играет спин-орбитальное взаимодействие.

PACS: 75.30.Hx, 61.72.Lk

Целью настоящей работы является описание механизмов влияния внешнего магнитного поля на движение дислокаций в немагнитных кристаллах. В настоящее время получено большое число экспериментальных фактов, свидетельствующих о заметном влиянии относительно малых магнитных полей ~ 10 кОе на различные характеристики немагнитных кристаллов. Это влияние названо магнитопластическим эффектом. Для объяснения подобных явлений принято использовать модель квантовых состояний системы двух электронов, имеющих различные спиновые квантовые числа [1–5]. Считается, что магнитное поле порождает эволюцию состояния спинов в системе дислокация–парамагнитный центр между связывающим синглетным S -состоянием двух электронов и антисвязывающим триплетным T -состоянием. Из квантовой химии [6] в теорию магнитопластического эффекта перенесено несколько возможных механизмов синглет-триплетных переходов: Δg -механизм и релаксационные механизмы, а также механизм изотропного сверхтонкого взаимодействия неспаренных электронов с магнитными ядрами (СТВ-механизм).

Исследуется случай, когда введенные дислокации, двигаясь в поле внутренних напряжений кристалла, не могут преодолеть локальный барьер, возникающий между ионом парамагнитной примеси и атомом, принадлежащим дислокации. Данная ситуация соответствует образованию связи между ними в триплетном состоянии. Для преодоления такого барьера необходимо его понизить за счет примеси низколежащего синглетного состояния. Другой случай — когда система находится в связанном синглетном состоянии внутри потенциальной ямы, и для депиннинга необходима примесь высоколежащего триплетного состояния.

Обнаружено, что в изучаемой системе возможен альтернативный предложенным в [1–4] релаксационному и Δg -механизму способ перехода системы из триплетных состояний в синглетное и обратно. Он связан с возникновением при наложении внешнего магнитного поля относительно медленных биений амплитуд в волновой функции валентных электронов.

Рассматривается взаимодействие дислокаций с парамагнитным примесным центром в рамках модели, в

которой система двух взаимодействующих атомов связана ионной связью. В качестве модели выбран кристалл NaCl с введенными примесями Ca [1]. Процесс депиннинга является пороговым и носит эстафетный характер, так как происходит под действием внутренних напряжений кристалла в положении предельного равновесия. Для анализа энергетической структуры и волновой функции системы взаимодействующих атомов решается стационарное уравнение Шредингера для двух электронов, описывающее энергетический спектр взаимодействующих частиц в магнитном поле с учетом спин-орбитального взаимодействия между ними. Гамильтониан взаимодействия двух электронов

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 - g\mu_B \mathbf{B}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) + A(\mathbf{r}_1)(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{I}_1) + A(\mathbf{r}_2)(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{I}_2). \quad (1)$$

\hat{H}_0 содержит слагаемые, отвечающие за кинетическую энергию, кулоновское и обменное взаимодействия; \mathbf{B} — вектор магнитной индукции налагаемого поля; g — g -фактор частиц; μ_B — магнетон Бора; $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2$ — операторы спина и орбитального момента электронов; $A(\mathbf{r}_1)$ и $A(\mathbf{r}_2)$ — коэффициенты спин-орбитального взаимодействия электронов.

Волновая функция взаимодействующей системы является суперпозицией волновых функций синглетного ψ_S и триплетных ψ_T состояний

$$\Psi(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C_0 \psi_S + C_1 \psi_{T_0} + C_2 \psi_{T_1} + C_3 \psi_{T_{-1}},$$

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) S, \quad \psi_{T_0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) T,$$

$$\psi_{T_1} = \alpha_1 \alpha_2 T, \quad \psi_{T_{-1}} = \beta_1 \beta_2 T. \quad (2)$$

C_0, C_1, C_2, C_3 — амплитуды синглетного и триплетных состояний в полной волновой функции; α и β — одночастичные спиновые функции; S и T — симметричная и антисимметричная пространственные волновые функции пары взаимодействующих электронов, которые

строятся на базе одноэлектронных волновых функций

$$S = \frac{1}{\sqrt{3}} [P_1(\mathbf{r}_1)P_{-1}(\mathbf{r}_2) + P_1(\mathbf{r}_2)P_{-1}(\mathbf{r}_1)] + \frac{1}{\sqrt{3}} P_0(\mathbf{r}_1)P_0(\mathbf{r}_2),$$

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} [P_1(\mathbf{r}_1)P_{-1}(\mathbf{r}_2) - P_1(\mathbf{r}_2)P_{-1}(\mathbf{r}_1)]. \quad (3)$$

$P(\mathbf{r}_1)$ и $P(\mathbf{r}_2)$ — пространственные волновые функции p -электронов, образующих связь. Спин-орбитальное взаимодействие в присутствии внешнего магнитного поля приводит к смешиванию волновых функций синглетного и триплетных состояний. Получена зависимость энергии основного и возбужденных состояний от внешнего магнитного поля в первом приближении теории возмущений

$$E_0(\mathbf{B}) = E_0 - \Delta_0(\mathbf{B}), \quad \Delta_0(\mathbf{B}) = \frac{V_{12}^2 \Delta E_1}{\Delta E_1^2 - (2g\mu_B B_x)^2},$$

$$E_1(\mathbf{B}) = E_1 + \Delta_1(\mathbf{B}), \quad \Delta_1(\mathbf{B}) = \frac{V_{12}^2 + (2g\mu_B B_x)^2}{\Delta E_1},$$

$$E_{\pm 1}(\mathbf{B}) = E_1 + \Delta_{\pm 1}(\mathbf{B}),$$

$$\Delta_{\pm 1}(\mathbf{B}) = \frac{V_{12}^2 + (2g\mu_B B_x)^2}{\Delta E_1} \pm 2g\mu_B B_x.$$

Здесь E_0 и E_1 — энергия уровней без возмущения \hat{V} ; $\Delta E_1 = E_1 - E_0$, $V_{12} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle P_1(\mathbf{r}_1) | A(\mathbf{r}_1) | P_1(\mathbf{r}_1) \rangle$ — матричный элемент, B_x — проекция вектора магнитной индукции на ось, перпендикулярную оси, соединяющей атомы.

Включение магнитного поля приводит к изменению соотношения между связывающей и антисвязывающей компонентами волновой функции и изменению положения равновесия всей системы. Расстояние между ядрами атомов увеличивается на величину

$$\Delta Z = \frac{3(2g\mu_B B_x)^2 V_{12}^2}{\gamma \Delta E_1^4} \frac{\partial E_1(\mathbf{B}, Z)}{\partial Z}, \quad (4)$$

где $\gamma = \partial^2 E_0(\mathbf{B}, Z) / \partial Z^2$, Z — расстояние между ядрами взаимодействующих атомов.

Динамика процесса распада системы дислокация-стопор изучается на основе решения системы уравнений, включающих временное уравнение Шредингера и уравнение движения, описывающее движение атома в существующем потенциальном поле.

Пространственная волновая функция электронов в движущемся потенциале раскладывается по базису собственных волновых функций ϕ_j оператора (1) в магнитном поле, получаемых при решении стационарного уравнения Шредингера. Получены уравнения для оценки

изменения вклада каждого из состояний системы

$$i\hbar \dot{a}_k(t) = \sum_{n=0}^3 a_n(t) m b \ddot{Z}(t) \times \exp\left(i \frac{(E_k(\mathbf{B}, Z) - E_n(\mathbf{B}, Z))}{\hbar} t\right), \quad (5)$$

$$M \ddot{Z}(t) = -\frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{m \dot{Z}^2}{2} + \sum_{i=0}^3 E_i(\mathbf{B}, Z) |a_i(t)|^2 \right). \quad (6)$$

Здесь M — масса отрывающегося сегмента дислокации, $b = \langle S | z | T \rangle$; m, z — масса и координаты электрона; $a_k(t)$ — искомые коэффициенты разложения. Данная система уравнений позволяет выяснить возможные условия преодоления сегментом дислокации активационного барьера, препятствующего его движению. Для упрощения решения уравнений (5) и (6) вместо системы из четырех уровней рассматривается система из двух уровней — основного и возбужденного. Считается, что до включения магнитного поля система полностью находилась в синглетном или одном из триплетных состояний. В области нахождения центра дислокации разлагаем в ряд потенциальную энергию взаимодействия атомов и получаем уравнение (6) в виде

$$\ddot{Z}(t) \approx -\omega^2 Z - \frac{1}{M} |a_0(t)|^2 \frac{\partial E_1(\mathbf{B}, Z)}{\partial Z}, \quad (7)$$

где ω — частота колебаний атома в потенциальной яме.

Для анализа возможных решений системы уравнений (5) будем рассматривать в первом приближении вклады отдельных состояний как одномерные осцилляторы, которые колеблются с одинаковыми частотами $\omega_{\Delta E} = (E_1 - E_0) / \hbar \approx 10^{15}$ Hz в параболической потенциальной яме,

$$\ddot{X} = \omega_{\Delta E} X + \omega_{SO}(X - Y),$$

$$\ddot{Y} = \omega_{\Delta E} Y - \omega_{SO}(X - Y), \quad (8)$$

где X, Y — обобщенные координаты, соответствующие колебаниям волновых функций синглетного и триплетного состояний электронов; ω_{SO} — частота колебаний, зависящая от магнитного поля и спин-орбитального взаимодействия, $\omega_{SO} \ll \omega_{\Delta E}$.

Спин-орбитальное взаимодействие между электронами приводит к тому, что в такой системе могут возникнуть относительно медленные биения амплитуд колебаний. Это приводит к периодическому нарастанию вклада синглетных и триплетных состояний.

Для оценки частоты биений $\omega_{S-T} = \omega_{SO}^2 / \omega_{\Delta E}$, возникающих после наложения магнитного поля, полагаем, что величина спин-орбитального взаимодействия является постоянной $E_{SO} \sim 10^{-3} - 10^{-4}$ eV, и ω_{S-T} определяется начальным сдвигом плотности электронов (4). Частота биений быстро растет с увеличением магнитной индукции: $\omega_{S-T} = kB^2$. При выбранных значениях

энергий взаимодействия оценка среднего времени таких биений дает величину $\tau_{S-T} \sim 10^{-6} - 10^{-8}$ s, что на несколько порядков больше среднего времени колебаний сегмента дислокации $\sim 10^{-9}$ s. Полученная оценка среднего времени такого рода переходов между состояниями дает величины между известными значениями для Δg -механизма $\tau_{ST_0} \sim 10^{-9}$ s [6] и релаксационного механизма $\tau_{dp} \sim 10^{-5} - 10^{-4}$ s [1], которые отождествляют со средним временем открепления дислокации. При оценке времени биений мы пренебрегали сложной зависимостью поведения величины спин-орбитального взаимодействия во времени и от изменения вкладов состояний в полную волновую функцию. Учет этого обстоятельства приводит к сложному поведению вкладов состояний с течением времени и увеличению среднего времени перехода между синглетным и триплетными состояниями.

Предложенный механизм влияния магнитного поля на процессы, происходящие в системе дислокация–примесь, предполагает учет спин-орбитального взаимодействия как существенного компонента явления. Обнаруженный эффект смешивания состояний, возникающий в результате биений волновой функции валентных электронов, может являться альтернативой рассматривавшимся ранее [1–6]. Полученная оценка для характерного времени открепления дислокации от точечного дефекта по порядку величины близка к экспериментальному значению и ранее сделанным оценкам в рамках других моделей [1]. Это позволяет надеяться, что дальнейшее уточнение модели приведет к улучшению согласия и более глубокому пониманию физики магнитопластического эффекта.

Список литературы

- [1] В.И. Альшитц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, Е.А. Петржик. Кристаллография **48**, 5, 838 (2003).
- [2] М.И. Молоцкий. ФТТ **35**, 1, 11 (1993).
- [3] M. Molotskii, V. Fleurov. Phys. Rev. Lett. **78**, 14, 2779 (1997).
- [4] M. Molotskii, V. Fleurov. Phys. Rev. B **56**, 17, 10 809 (1997).
- [5] Ю.И. Головин. ФТТ **46**, 5, 769 (2004).
- [6] А.Л. Бучаченко, К.М. Салихов, Р.З. Сагдеев. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Наука, М. (1978).