

TỪ TÍNH ĐỊA PHƯƠNG TRONG MÔ HÌNH COBALT VÔ ĐỊNH HÌNH

Võ Văn Hoàng

Ban Vật lý Trường Đại Học Đại Cường .

Tô Bá Văn

Viện Khoa Học Vật Liệu Thành Phố Hồ Chí Minh

Phạm Khắc Hùng

Viện Vật Lý Kỹ Thuật Đại Học Bách Khoa Hà Nội

Trung Tâm Khoa Học Tự Nhiên Và Công Nghệ Quốc Gia

(Nhận được ngày 27/12/1997)

Tóm tắt:

Từ tính mô hình Cobalt tinh thể và mô hình Cobalt vô định hình 1000 hạt được nghiên cứu bằng phương pháp Monte-Carlo và mô hình Ising. Tích phân trao đổi được dùng như một hàm chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa các nguyên tử. Nhiệt độ Curie của mô hình Cobalt tinh thể và Cobalt vô định hình được xác định lần lượt là 1380 K và 1100 K phù hợp rất tốt với thực nghiệm. Ở nhiệt độ thấp, độ từ hóa tự phát của Cobalt vô định hình bằng khoảng 99% của Co tinh thể, điều này hoàn toàn phù hợp với số liệu thực nghiệm. Độ từ hóa của Co tinh thể và vô định hình (VĐH) biến đổi phù hợp định luật Bloch ở nhiệt độ thấp và định luật Weiss ở nhiệt độ cao. Lần đầu tiên, từ tính địa phương của mô hình Cobalt vô định hình được khảo sát qua phân bố Spin trong mô hình.

I. Giới thiệu

Từ tính kim loại vô định hình (VĐH) được nghiên cứu bằng nhiều phương pháp thực nghiệm và mô hình hóa (MHH) trên máy tính trong thời gian gần đây, bởi vì triển vọng ứng dụng rất thực tế vật liệu từ vô định hình rất lớn. Bằng thực nghiệm, moment từ nguyên tử và nhiệt độ Curie được xác định cho hàng loạt hợp kim Co-B, Co-P, Fe-B và Fe-P [1-4]. Các kim loại VĐH như Fe, Co, Ni với khoảng 5% tạp chất cũng được nghiên cứu trong các công trình [5,6,7].

Tuy nhiên, bản chất của tương tác trao đổi giữa các spin trong vật liệu VĐH vẫn còn là điều bí ẩn. Một số tác giả cho rằng tương tác trao đổi giữa các spin trong kim loại VĐH phụ thuộc nhiều hơn vào số phối vị [8], số khác lại cho rằng biểu thức này phụ thuộc hơn vào khoảng cách giữa các nguyên tử [9].

Trong công trình này, từ tính mô hình Cobalt tinh thể (fcc) và mô hình Cobalt VĐH được tính bằng phương pháp Monte-Carlo trong mô hình Ising. Mô hình Co VĐH chứa 1000 hạt trong khối lập phương với điều kiện biên tuần hoàn [10]. Mô hình fcc Co chứa 864 hạt. Ban đầu mỗi nguyên tử trong mô hình được gán cho một spin (S_i) có chiều hướng lên trên. Năng lượng tương tác trao đổi được tính theo công thức:

$$E_i = -2 \sum_{ij} AS_i S_j \quad (1)$$

trong đó S_i, S_j có thể có giá trị ± 1 ; a là tích phân trao đổi.

Năng lượng được tính giữa spin trung tâm và các spin lân cận giới hạn bởi bán kính tác dụng $r_o = 3,3 \cdot 10^{-10}$ m của biểu thức A

Đối với Cobalt dạng tinh thể lẫn VDH không có số liệu thực nghiệm chứng tỏ rằng A phụ thuộc vào số phối vị. Do vậy, biểu thức A được chọn như một hàm số chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa các nguyên tử, sao cho khi dùng để tính từ tính Cobalt tinh thể thì nhiệt độ Curie của mô hình Cobalt tinh thể phù hợp tốt với thực nghiệm. Cuối cùng, biểu thức được chọn như sau:

$$\frac{A(r)}{k} = \begin{cases} 217,9595 & r \leq 2,47 \\ 140 \exp\left(\frac{2,5032 - r}{0,075}\right) & 2,47 < r < 3,3 \\ 0 & r > 3,3 \end{cases} \quad (2)$$

k – Hằng số Boltzmann;

r – khoảng cách giữa các spin, tính bằng đơn vị 10^{-10} m.

Phương pháp tính : Ban đầu gán cho từng nguyên tử 1 spin có chiều hướng lên ($S=1$), tính năng lượng tương tác trao đổi E của spin thứ nhất với các spin lân cận trong mặt cầu phối vị thứ nhất ($r_o = 3,3 \cdot 10^{-10}$ m) theo công thức (1). Xác định xác suất tồn tại của trạng thái với năng lượng E theo công thức sau:

$$W = \frac{1}{1 + e^{\frac{E}{kT}}} \quad (3)$$

Và so sánh w với một số ngẫu nhiên $0 < p < 1$ (cho bởi hàm Random của Turbo Pascal).

Nếu $w < p$ thì đổi chiều spin của nguyên tử vừa xét ($S = 1$), nếu $w \geq p$ thì tạm chấp nhận chiều spin của nguyên tử vừa xét, chuyển sang thử đổi chiều các spin còn lại trong mô hình bằng cách như vừa nêu trên và lập lại quá trình thử đổi chiều spin nhiều lần cho tất cả các nguyên tử trong mô hình, cho đến khi đạt trạng thái cân bằng spin.

Sau khoảng 1000 lần thử đổi chiều của từng spin, tiến hành thêm 10^4 đổi chiều từng spin để tính giá trị trung bình độ từ hóa, độ lệch quân phương...

II. Kết quả và thảo luận:

1/ Kết quả mô hình hóa từ mô hình cobalt tinh thể 864 hạt (fcc).

Sự phụ thuộc độ từ hóa tự phát của mô hình I vào nhiệt độ T (k – hằng số Boltzmann) được thể hiện qua hình 1. (I_{max} – giá trị cực đại của I khi toàn bộ spin đều hướng lên trên). Nhiệt độ Curie của mô hình có thể xác định theo sự phụ thuộc σ/σ_o vào nhiệt độ. (σ - độ lệch quân phương của tổng spin trong hệ

các spin không tương tác, $\sigma_0 = \sqrt{N}$, N - là tổng số hạt trong mô hình). (xem hình 1).

Cực đại của đường cong này tương ứng với nhiệt độ Curie của mô hình Cobalt tinh thể (fcc) $T_c = 1380$ K, giá trị này rất gần với số liệu thực nghiệm ($T_c = 1388$ K[11]).

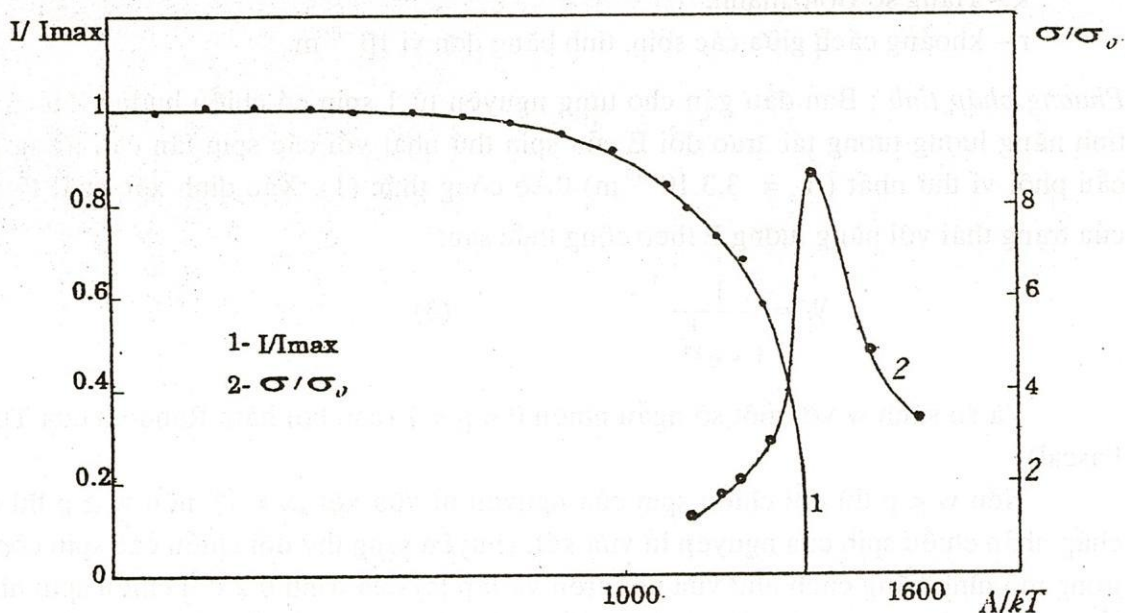
Sự phụ thuộc I/I_{max} vào $(T/T_c)^{3/2}$ có thể khảo sát qua hình 2. Có thể thấy rằng ở nhiệt độ thấp thì sự phụ thuộc này là tuyến tính, điều này chứng tỏ rằng định luật Bloch đúng cho trường hợp Cobalt tinh thể:

$$I/I_{max} = 1 - \beta(T/T_c)^{3/2} \quad (4)$$

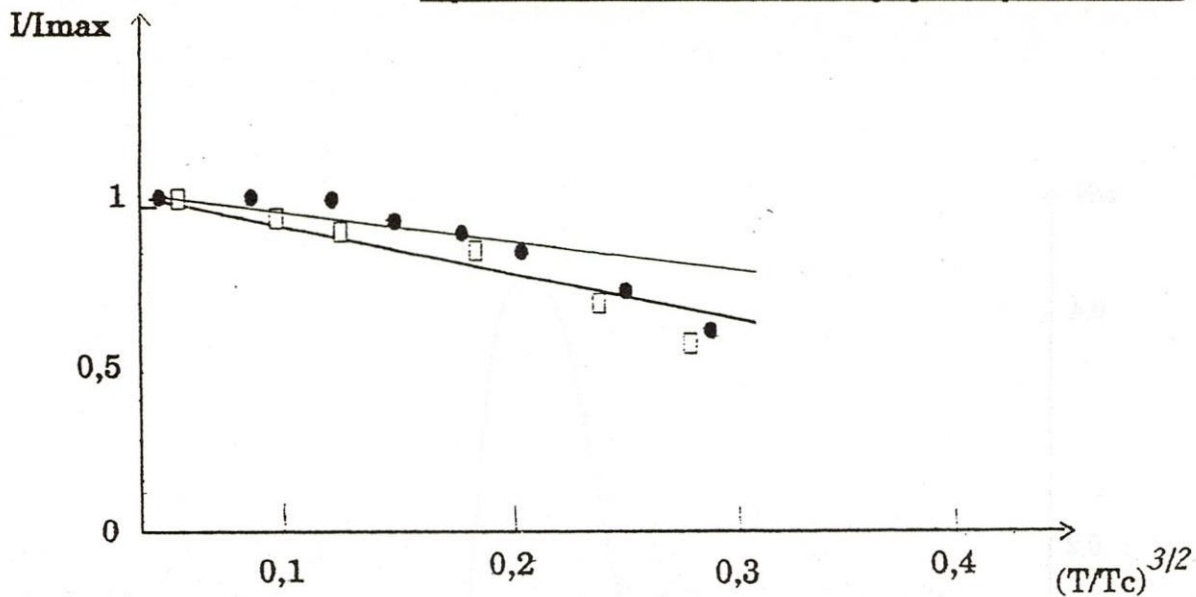
Với mô hình fcc Co vừa nêu, hệ số $\beta = 0,102$. Ở nhiệt độ cao gần T_c , độ từ hóa fcc Co biến đổi theo định luật Weiss [9]:

$$I/I_{max} = \gamma \sqrt{1 - T/T_c} \quad (5)$$

Với hệ số γ được xác định là 1,5 (xem hình 5). Giá trị này phù hợp với các giá trị cho trường hợp vật liệu từ tinh thể ($\gamma = 1,5 \div 2$ [9]).



Hình 1: Từ tính mô hình Cobalt tinh thể

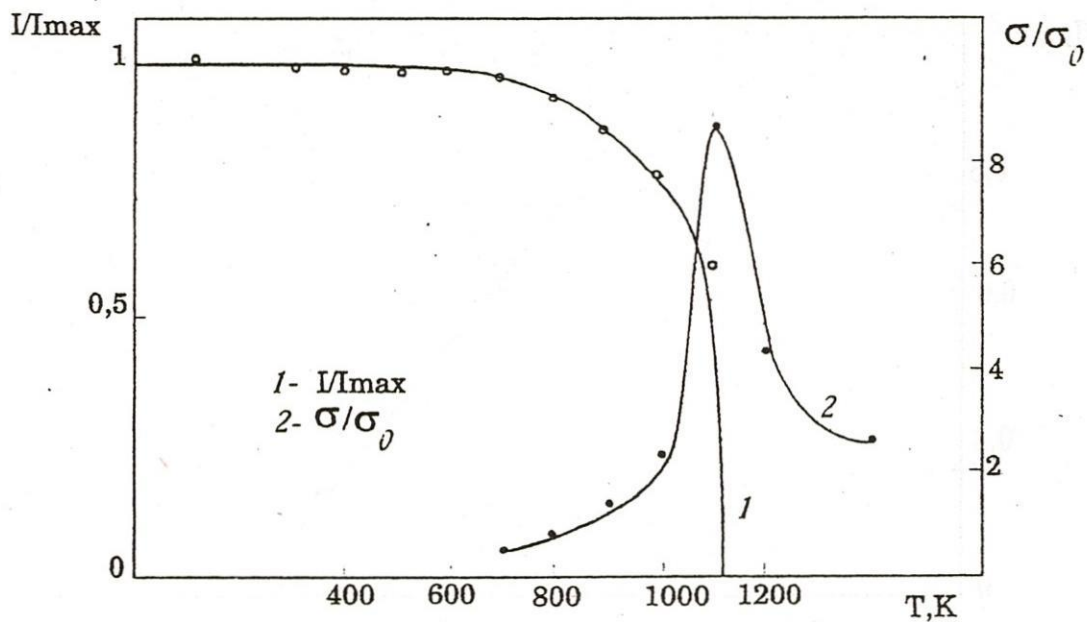


Hình 2: Sự phụ thuộc I/I_{max} mô hình Cobalt vào $(T/T_c)^{3/2}$

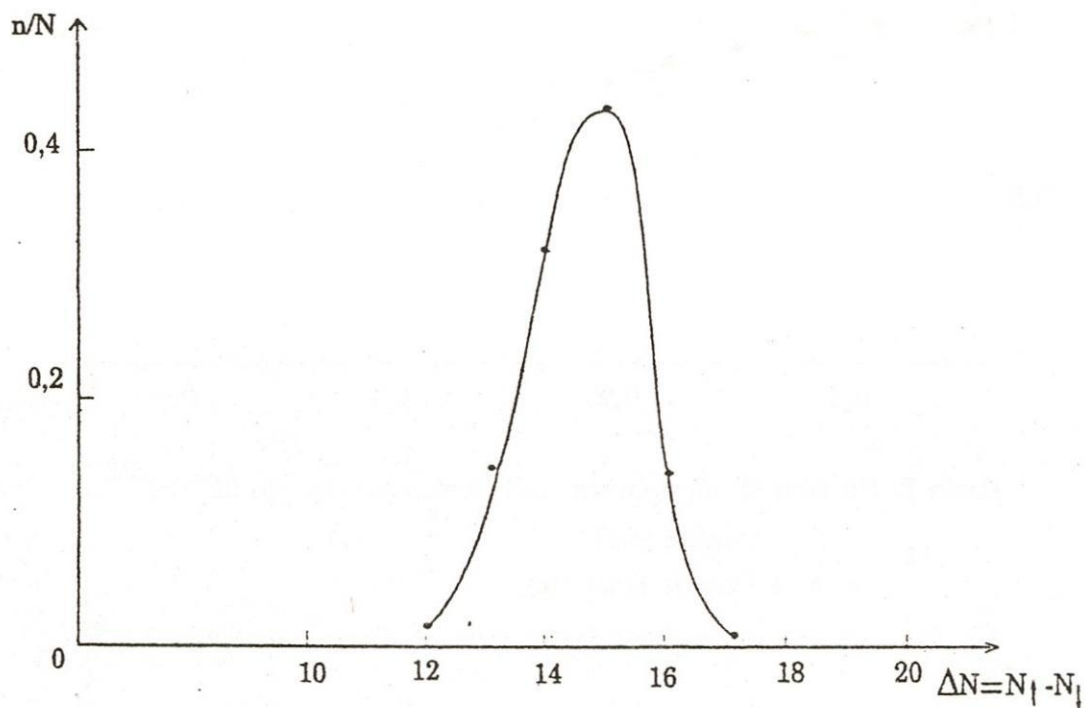
- □ □ Cobalt VDH
- ● ● Cobalt tinh thể

Hình 2: Sự phụ thuộc I/I_{max} mô hình Cobalt Vào $(T/T_c)^{3/2}$

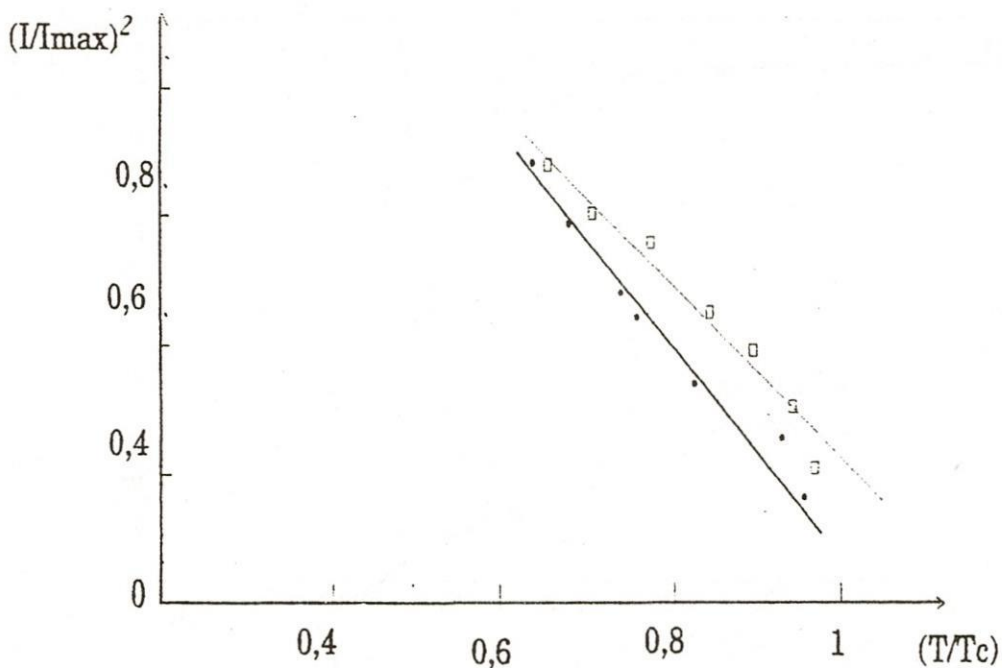
- □ □ Cobalt VDH
- ● ● Cobalt tinh thể



Hình 3: Từ tính mô hình Cobalt VDH



Hình 4: Sự phân bố spin trong mô hình Cobalt VDH
 $T \leq 300$ K



Hình 5: Sự phụ thuộc $(I/I_{max})^2$ mô hình Cobalt vào (T/T_c)
 □□□ Cobalt VDH
 ●●● Cobalt tinh thể.

2/ Kết quả mô hình hóa từ tính mô hình Cobalt VĐH 1000 hạt.

Mô hình Cobalt VĐH 1000 hạt dựng bằng phương pháp Statical Relaxation và cấu trúc mô hình phù hợp rất tốt với thực nghiệm, chi tiết về cấu trúc mô hình này có thể xem trong [10].

Từ tính mô hình Cobalt VĐH được nghiên cứu bằng phương pháp tương tự như đối với mô hình Cobalt tinh thể với cùng một biểu thức tích phân trao đổi (2). Sự phụ thuộc I/I_{max} và σ/σ_0 của mô hình vào T có thể xem trên hình 3.

Sự phụ thuộc I/I_{max} của Cobalt VĐH vào nhiệt độ có khác một ít so với mô hình Fe VĐH [8], bởi vì bên trong mô hình Cobalt VĐH không có các vùng vi mô mang từ tính nghịch từ như trong mô hình Fe VĐH.

Nhiệt độ Curie T_c của mô hình Cobalt VĐH có thể xác định qua sự phụ thuộc σ/σ_0 vào nhiệt độ, cực đại sự phụ thuộc này tương ứng nhiệt độ Curie $T_c = 1100$ K. Vì không có số liệu thực nghiệm giá trị T_c đối với Cobalt VĐH nên có thể tìm gần đúng bằng phương pháp ngoại suy từ các giá trị thực nghiệm T_c của hợp kim hệ Co-B [1]. Khi đó $T_c = 1125$ K, như vậy nhiệt độ Curie của mô hình Cobalt VĐH xem như trùng với giá trị ngoại suy này. Với mô hình Cobalt VĐH ta có tỷ lệ $(T_{c\text{ VĐH}} / T_{c\text{ tinh thể}}) = 0,79$ rất gần với trường hợp Nickel ($0,6 \div 0,8$ [12,13]). Nhiệt độ Curie của mô hình Cobalt VĐH cao hơn khá nhiều so với mô hình Fe VĐH ($T_c \cong 400$ K[8]).

Do đó độ từ hóa thực tế tỷ lệ với $P_{\text{effect}} \cdot I$, với Cobalt ta có tỷ lệ giữa độ từ hóa tự phát của Cobalt VĐH và Cobalt tinh thể ở nhiệt độ thấp là:

$$\alpha = (I_{\text{VĐH}} / I_{\text{tinh thể}}) = (1,70 \cdot I / 1,714 \cdot I_{\text{max}})$$

Trong đó, moment từ nguyên tử của Cobalt VĐH là $P_{\text{effect}} = 1,70 \mu_B$. Theo hình 3, ở nhiệt độ $T = 100$ K tỷ lệ $(I/I_{\text{max}}) = 1$. Do đó, nhiệt độ thấp $\alpha = 0,99$. Như vậy, độ từ hóa tự phát của mô hình Cobalt VĐH ở nhiệt độ thấp ít hơn so với Cobalt tinh thể 1%, điều này xem như hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm, theo kết quả thực nghiệm của công trình [6] $\alpha = 0,95$. Tuy nhiên, mẫu Cobalt VĐH mà các tác giả dùng trong [6] có chứa đến 5% tạp chất.

Qua hình 2, có thể thấy ở nhiệt độ $T \leq 500$ K thì sự phụ thuộc I/I_{max} vào (T/T_c) là tuyến tính. Như vậy, định luật Bloch vẫn đúng cho Cobalt VĐH với $T \leq 500$ K. Kết quả thực nghiệm cũng cho thấy định luật Bloch vẫn đúng cho cả Fe VĐH [7]. Trong trường hợp mô hình Co VĐH hệ số $\beta = 0,137$ lớn hơn so với Co tinh thể (xem ở trên). Điều này liên quan đến sự giảm giá trị trung bình của đại lượng tích phân trao đổi A trong vật liệu vô định hình, dẫn đến sự giảm nhiệt độ Curie T_c so với tinh thể.

Độ từ hóa tự phát của Co VĐH ở nhiệt độ cao (vùng gần T_c) biến đổi phù hợp với định luật Weiss với hệ số $\gamma=1,28$ nhỏ hơn so với tinh thể (xem hình 5)

Một trong những điều được quan tâm khi nghiên cứu từ tính là khảo sát sự phân bố spin trong kim loại VĐH. Điều này chỉ có thể khảo sát chi tiết bằng mô hình hóa trên máy tính. Lần đầu tiên, một khảo sát như vậy được tiến hành với mô hình Cobalt VĐH ở các nhiệt độ khác nhau. Kết quả được trình bày ở hình 4. Phương pháp tính phân bố spin được tiến hành như sau: lần lượt lấy từng

nguyên tử làm tâm một mặt cầu bán kính $r_0 = 3,3 \cdot 10^{-10} \text{m}$, độ từ hóa tự phát của vùng giới hạn bên trong mặt cầu được tính qua hiệu của tổng số spin hướng lên và tổng số spin hướng xuống kể cả spin trung tâm.

$$\Delta N = N\uparrow - N\downarrow \quad (6)$$

$N\uparrow$, $N\downarrow$ lần lượt là tổng số spin hướng lên hoặc hướng xuống (6) trong vùng giới hạn bởi mặt cầu bán kính $r_0 = 3,33 \cdot 10^{-10} \text{m}$.

Qua bảng 1 và hình 4 ta thấy ở nhiệt độ $T \leq 300\text{K}$ phần lớn các nguyên tử Cobalt nằm trong vùng giới hạn $\Delta N = 14-15$, có 22 nguyên tử nằm trong vùng có $\Delta N=17$ và 10 nguyên tử nằm trong vùng có $\Delta N = 12$. Những $\Delta N = 17$ xem như vùng vi mô có tính sắt từ mạnh, ngược lại vùng có $\Delta N = 12$ xem như vùng vi mô có tính sắt từ yếu.

Nhiệt độ càng lên cao, sự phân bố spin trong mô hình càng rộng, trong mô hình vẫn tồn tại những vùng vi mô có tính sắt từ mạnh, và ngược lại tồn tại những vùng có tính sắt từ rất yếu (xem bảng 1).

Như vậy, trong mô hình cobalt VĐH dù không có các vùng vi mô có tính nghịch từ, nhưng sự phân bố spin trong mô hình là không đồng nhất, tạo thành những vùng vi mô có tính sắt từ mạnh hay yếu khác nhau, điều này liên quan đến cấu trúc vi mô không đồng nhất của mô hình kim loại VĐH. Ở nhiệt độ thấp sự phân bố spin trong mô hình Cobalt VĐH tương tự như sự phân bố số phối vị trong mô hình. (xem [10]).

Bảng 1: Sự phân bố spin trong mô hình Cobalt vô định hình 1000 hạt.

ΔN - hiệu tổng số spin hướng lên ($N\uparrow$) và tổng số spin hướng xuống ($N\downarrow$) trong mặt cầu thể tích $V = \frac{4}{3} \pi r_0^3$; $r_0 = 3,3 \cdot 10^{-10}$ m.

n - số nguyên tử Cobalt trong mô hình ΔN tương ứng ở các nhiệt độ khác nhau.

N - tổng số nguyên tử trong mô hình.

$\Delta N_{\text{Neuron}} = \text{Neuron}\uparrow - N\downarrow$	N/N			
	100K	300K	700K	1000K
1	0	0	0	0,004
2	0	0	0	0,012
3	0	0	0	0,014
4	0	0	0,002	0,032
5	0	0	0,006	0,028
6	0	0	0,006	0,032
7	0	0	0,012	0,064
8	0	0	0,016	0,096
9	0	0	0,034	0,112
10	0	0	0,056	0,106
11	0	0	0,70	0,134
12	0,010	0,010	0,104	0,110
13	0,148	0,148	0,182	0,112
14	0,342	0,342	0,238	0,068
15	0,358	0,358	0,216	0,056
16	0,120	0,120	0,050	0,014
17	0,022	0,022	0,008	0,004
18	0	0	0	0
19	0	0	0	0
20	0	0	0	0

III. Kết luận:

- Với biểu thức tích phân trao đổi dạng hàm số phụ thuộc vào khoảng cách giữa các nguyên tử, bằng phương pháp Monte-Carlo trong mô hình Ising có thể tính từ tinh Cobalt tinh thể và VĐH, kết quả tính toán phù hợp tốt với thực nghiệm.
- Độ từ hóa tự phát của Cobalt VĐH ở nhiệt độ thấp bằng 99% của độ từ hóa tự nhiên Cobalt tinh thể.
- Nhiệt độ Curie của Cobalt VĐH thấp hơn ở nhiệt độ Curie của Cobalt tinh thể gần 20%.

- Sự biến thiên độ từ hóa của mô hình Cobalt tinh thể và VĐH theo nhiệt độ phù hợp với định luật Bloch và định luật Weiss .
- Sự phân bố spin trong mô hình Cobalt VĐH là không đồng nhất, trong mô hình Cobalt VĐH tồn tại các vùng vi mô có tính sắt từ mạnh hoặc yếu khác nhau.

LOCAL MAGNETISM IN AMOPHOUS COBALT MODEL

Võ Văn Hoàng, Tô Bá Văn, Phạm Khắc Hùng

Abstract:

Magnetism of crystalline and amorphous Cobalt models containing 1000 particles has been studied using Monte-Carlo method and Ising model. The exchange interaction parameter has been used as a function of an interparticle distance. The Curie temperatures of these models have been determined about 1380 K and 1100 K respectively, which are in good agreement with experimental data.... The spontaneous magnetization of the amorphous Cobalt at low temperatures is equal about 99% of the spontaneous magnetization of crystalline Cobalt. Magnetizations of the fcc and amorphous Co follow Bloch's law at low temperatures and follow Weiss's law at high temperatures. Local magnetism in the amorphous Cobalt model has been investigated by the spin distribution in the model.

Tài liệu tham khảo

1. Hasegawa R, Ray R. , J.Appl.Phys., 1979, V.50, p.1506.
2. Cochrane R.W, Cargill G.S., Phys.Rev.Lett, 1974, V.32, p.476.
3. Pan D., turnbull D., T.Appl.Phys, 1974, V.45, p.1106.
4. Kazama n.s, Masumoto T., Mitera M., J.Magn and Magn. Mater 9, V.15-18, N^o3, p.891.
5. Litvinsev V.V, Harinsky B.I, Moros, J.PhysicaMetalov metalovezenie, 1989, V.67,N^o5, p.891.
6. Osukbovsky B.E, litvinsev V.V, Zudina L.A...J.Physical metalov metallovezenie, 1990, V.66, N^o5, p.190.
7. Mark W.G, Myron B.S, Kenneth S.S, Physycal Review B, 1993, V.48, N^o1, p.269.
8. Belashchenko D.K., Metalophysycal(Kiev), 1987, V.9, N^o1, p.3.
9. Livshish B.G, Kraposhin B.C., Linesky A.L., Metalurga, 1980, p.320.
10. Võ Văn Hoàng, Belashchenko D.K.Izvestija Vuzov USSR, 1991, N^o7, p.68.
11. Ascroft N.W., Mermin N.D., Holt, Rinehart and Winston, 1976, p.826.

12. Tamura K., Enndo H., Phys.Rev.Lett, 1969, V.29, p.52.

13. Banniger U., Busch G.Phys.Rev.Lett, 1970, V52, p.585.