Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 6, с. 383 – 390 

# Спин-флуктуационный переход в неупорядоченной модели Изинга

*Н. А. Богословский, П. В. Петров*[1)] *Н. С. Аверкиев*

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 9 июля 2021 года
После переработки 27 августа 2021 г.
Принята к публикации 27 августа 2021 г.

В работе исследуется модель примесной системы в полупроводниках, состоящая из случайно расположенных в пространстве спинов с водородоподобной зависимостью обменной энергии от расстояния в гамильтониане Изинга. Рассчитаны функция распределения обменной энергии и средний квадрат магнитного момента в зависимости от концентрации. Показано, что при концентрации, близкой к концентрации перехода металл-диэлектрик в полупроводниках, в системе спинов происходит так называемый спин-флуктуационный переход, связанный с изменением среднего квадрата магнитного момента.

DOI: 10.31857/S1234567821180117

В настоящей работе исследуются свойства неупорядоченной модели Изинга с водородоподобной зависимостью обменной энергии от расстояния. Интерес к этой теме вызван, главным образом, публикацией новых экспериментальных данных, полученных при исследовании полупроводниковых гетероструктур [1], компенсированных полупроводников [2, 3], а также материалов с сильными электронными корреляциями [4, 5]. При интерпретации результатов вычислений принципиально важной оказалась идея спин-флуктуационного перехода, недавно предложенная Демишевым [4, 6].

Магнитные свойства модели Изинга для полностью случайно расположенных спинов изучены недостаточно. В основном модель Изинга исследуется на регулярных решетках [7], или на решетках с различным образом введенными фрустрациями (см., например, [8]). По причине сложности прямой задачи часто изучаются нефизичные модели, такие как решетка Бете или спиновое стекло в модели Шеррингтона–Киркпатрика. Одним из основных результатов для модели случайно расположенных спинов до сих пор является численный расчет Бхатта и Ли 1982 г., демонстрирующий отсутствие дальнего антиферромагнитного порядка в системе примесей, взаимодействующих в рамках как гамильтониана Изинга, так и Гайзенберга [9]. Отсутствие дальнего порядка объясняется возникновением так называемой синглетной фазы, в которой близко расположенные примеси связываются в состояния с нулевым полным моментом и перестают взаимодействовать с остальным окружением. В работе [9] было показано, что синглетная фаза существует не только при низких концентрациях, но и при концентрациях примесей, намного превосходящих концентрацию перехода металл-диэлектрик в полупроводниках. При таких концентрациях модель прямого водородоподобного обмена неприменима, из чего следовал вывод, что спиновое упорядочение в полупроводниковых системах невозможно.

Главное отличие представленного ниже подхода от работы Бхатта и Ли заключается в использовании более корректной зависимости обменной энергии $J$ как функции расстояния $r_{ij}$ между примесными центрами $i$ и $j$, вычисленной в работах [10, 11]

$$J(r_{ij}) = \pm J_0 \, (r_{ij}/a)^{5/2} \exp\left(-2r_{ij}/a\right). \qquad (1)$$

Неучтенный Бхаттом и Ли степенной префактор в (1) существенно влияет на величину обмена, пренебрежение им недооценивает обмен в $(r/a)^{5/2}$ раз, что на расстоянии 10 боровских радиусов $a$ дает $\approx 300$ (см. рис. 1). Кроме того, мы рассматриваем не только антиферромагнитный, но и ферромагнитный вид взаимодействия. В предыдущей работе нами численно исследовалась температурная зависимость магнитной восприимчивости в такой модели с использованием метода Метрополиса при концентрации вблизи перехода металл-диэлектрик [12]. Было показано, что наличие префактора значительно изменяет поведение восприимчивости для ферромагнитного вида взаимодействия. В зависимости восприимчивости от температуры префактор приводил к возникновению максимума, соответствующего наиболее вероятной энергии взаимодействия, т.е. максимуму функции $4\pi(r/a)^2 J(r/a)$. В антиферромагнитном случае влияние префактора на температурную зависимость оказалось незначительным.

1)e-mail: pavel.petrov@gmail.com

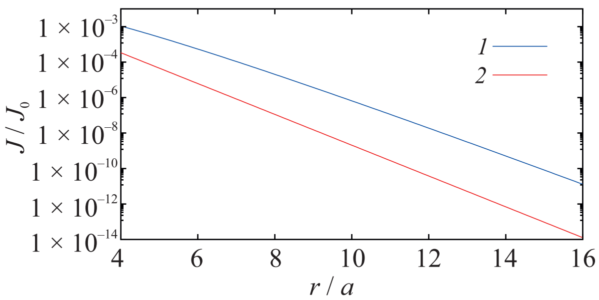


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вид функции $J(r/a)$ с учетом (*1*) и без учета (*2*) степенного предэкспоненциального множителя

Идея существования спин-флуктуационного перехода была недавно высказана Демишевым на основании анализа экспериментальных данных, полученных методом электронного-парамагнитного резонанса в материалах с сильными электронными корреляциями [4, 6]. Суть ее состоит в том, что параметр, управляющий фазовым переходом, влияет не на средний магнитный момент $\langle S\rangle$, а только на его средний квадрат $\langle S^2\rangle$. Главное отличие от описаний, основанных на теории фазовых переходов Ландау и разнообразных вариантов ее развития, состоит в том, что средний спин здесь равен нулю по обе стороны от перехода, тогда как изменения происходят только с амплитудой спиновых флуктуаций. Таким образом, в качестве параметра порядка выступает не $\langle S\rangle$, а $\sqrt{\langle S^2\rangle}$. В моделях с регулярным расположением спинов усреднение обычно производится по элементарной ячейке, магнитной подрешетке, либо, в случае наличия беспорядка, по одной или нескольким координационным сферам. Здесь рассматриваются флуктуации полного спина системы из $N$ спинов случайно расположенных в трехмерном пространстве.

В представленной здесь модели управляющим параметром является концентрация примесных центров. При малой концентрации примесей взаимодействие их незначительно и приводит только к образованию небольшого числа попарно взаимодействующих центров в синглетном состоянии. Амплитуда спиновых флуктуаций в синглетной фазе слабо зависит от концентрации. Согласно [9], магнитная восприимчивость в этой фазе при высоких температурах соответствует закону Кюри, а при понижении температуры отклоняется от него в сторону уменьшения восприимчивости. Как будет показано ниже — при увеличении концентрации примесных центров, в случае ферромагнитного взаимодействия, флуктуации магнитного момента резко возрастают из-за возникновения случайно ориентированных доменов спонтанной намагниченности в местах скопления примесей. В антиферромагнитном случае, наоборот, в процессе перехода происходит уменьшение флуктуаций из-за образования антипараллельно ориентированных пар, которые взаимодействуют друг с другом слабее, нежели случайно ориентированные центры. Таким образом, возникает физическая картина спин-флуктуационного перехода, которую и предлагает Демишев: спонтанное изменение амплитуды флуктуаций намагниченности под воздействием изменения управляющего параметра при том, что сама средняя намагниченность остается равной нулю. Примечательно то, что эта физическая картина возникает в весьма простой модели, параметрами которой являются только безразмерные концентрация $na^3$ и температура $kT/J_0$.

Гамильтониан изучаемой системы имеет вид:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J(r_{ij})S_iS_j, \tag{2}$$

где $S_{i,j} = \pm 1$ – безразмерные спиновые переменные, соответствующие направлению магнитных моментов примесных центров. Суммирование ведется по всем случайно расположенным спинам примесных атомов, а функция $J(r_{ij})$ определена согласно (1). Аналитические решения для систем с гамильтонианом Изинга могут быть получены только для отдельных случаев, поэтому для исследования подобных задач широко используются приближенные методы. Мы будем использовать так называемый метод эффективного поля [7, 13], широко применяющийся при исследовании спиновых свойств в рамках модели Изинга. В рамках этого метода магнитные свойства спиновой системы вычисляются при помощи функции распределения обменного поля, действующего на случайно взятый спин $S_j$. При этом в данном случае удобнее оказалось вычислять функцию распределения не поля, а обменной энергии $W(JS)$.

Гамильтониан системы взаимодействующих спинов формально можно переписать в следующем виде:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J(r_{ij})S_iS_j = \frac{1}{2}\sum_{i} J_iS_i, \tag{3}$$

где $J_iS_i = S_i\sum_{j\neq i} J(r_{ij})S_j$ – обменная энергия, представленная в виде суммы взаимодействий спина $S_i$ со всеми остальными спинами. Покажем, что зная функцию распределения обменной энергии $W(JS)$, можно рассчитать магнитную восприимчивость материала.

Рассмотрим локализованный на центре $i$ спин, имеющий модуль магнитного момента $\mu$, и находящийся в слабом, таком, чтобы эффект Зеемана оставался линейным, магнитном поле $B$. Тогда, используя традиционный термодинамический подход, его средний магнитный момент можно записать как

$$M_i = \mu \tanh \frac{(J_i + \mu B)S_i}{kT}. \qquad (4)$$

Магнитная восприимчивость одного спина в зависимости от температуры в этом случае есть

$$\chi_i = \frac{\partial M_i}{\partial B} = \frac{\mu^2}{kT} \cosh^{-2} \frac{(J_i + \mu B)S_i}{kT}. \qquad (5)$$

Зная распределение обменной энергии $W(JS)$ для конкретных температуры и магнитного поля, можно получить выражение для магнитной восприимчивости всей системы просто через усреднение по обменной энергии:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{kT} \int\limits_{-\infty}^{\infty} W\left(JS\right)\ \cosh^{-2} \frac{(J + \mu B)S}{kT} d(JS), \quad (6)$$

где под $N$ нужно понимать полное число спинов. Поясним немного необычный выбор переменной интегрирования. Традиционно принято описывать систему спинов как две подсистемы со спинами вверх и вниз, и работать с ними раздельно. В нашем случае построение функции распределения в зависимости от $JS$ удобно, так как позволяет объединить эти две подсистемы в одну. Понять, как эта схема соотносится с традиционным описанием, можно, представив себе, что система спинов находится в состоянии минимума энергии, когда переворот спина $S_i$ может только повысить ее на энергию $J_i$. В этом случае состояния со спинами, ориентированными вверх и вниз, разделятся на две половины. Состояния со спином $-1$ в координатах $JS$ будут находиться справа от нуля, а энергия для них будет направлена в отрицательную сторону. Состояния со спином $+1$ будут находиться слева от нуля и энергия для них будет как обычно направлена вверх. В точке $JS = 0$ будет находиться в этом случае химический потенциал для обоих подсистем. Можно провести аналогию между функцией $W(JS)$ и электронной плотностью состояний в полупроводнике. В этом случае состояния со спинами $\pm 1$ будут соответствовать электронам и дыркам, которые при нулевой температуре будут располагаться по разные стороны от уровня химического потенциала, и иметь противоположно направленные оси энергии.

В данной работе рассчитывается распределение обменной энергии только для двух случаев: системы полностью неупорядоченных спинов и системы спинов, находящихся в состоянии минимума обменной энергии. Это связано с большой вычислительной сложностью расчетов для конечных температур. Расчет для неупорядоченного случая весьма прост, это усреднение по системе случайно ориентированных спинов. Для вычисления $W(JS)$ в случае состояния с минимумом энергии нами был разработан эффективно работающий алгоритм минимизации обменной энергии путем последовательного переворота спинов с применением техники параллельного программирования. Число частиц в расчете составляло от 6 до 10 тыс., при этом учитывалось взаимодействие каждого спина с каждым.

Для поиска состояния с минимумом энергии используется метод численного моделирования согласно следующей схеме. Вначале генерируется система случайно расположенных центров со случайно ориентированными спинами. Далее, посредством последовательных переворотов спинов, имеющих в данной конфигурации максимальную обменную энергию, производится минимизация полной обменной энергии системы, вычисленной по формуле (2). Минимизация производится до тех пор, пока такой переворот возможен. В результате система случайно расположенных спинов приводится в так называемое псевдоосновное состояние, которое в подобных системах стекольного типа обычно принимается за основное. Для полученной в итоге процесса минимизации конфигурации спинов производилось вычисление распределения обменной энергии, после чего процесс повторялся $K = 10^4{-}10^6$ раз для заново сгенерированного случайного расположения центров.

Будет уместным кратко сравнить наши вычисления с методикой, использованной в работе Бхатта и Ли. В их расчете, как и у нас, исследовалась система, состоящая из 10 тыс. случайно расположенных спинов. По причине ограниченных возможостей компьютеров того времени ими учитывалось взаимодействие не каждого спина с каждым, а только взаимодействие внутри небольших кластеров из нескольких десятков спинов. Для каждого такого кластера рассчитывался энергетический спектр, после чего оценивалась ширина функции распределения обменной энергии. Пары примесных атомов, для которых обменная энергия превышала температуру, считались перешедшими в синглетное состояние и не дающими вклад в магнитную восприимчивость. Наш подход качественно похож на подход Бхатта и Ли. Разница состоит в том, что во-первых, вместо ширины распределения мы вычисляем все распределение целиком. Во-вторых, вместо простого отбрасывания пар, перешедших в синглетное состояние, мы используем формулу (6), в которой эту роль выполняет домножение на функцию $\cosh^{-2}(J_i+\mu B)S/kT$. Это колоколообразная функция, ширина которой сужается при понижении температуры, переставая учитывать тем самым состояния с обменной энергией большей, чем $kT$. Но, как уже говорилось во введении, наиболее существенную разницу с точки зрения физического описания системы составляет учет предэкспоненциального степенного множителя в зависимости $J(r/a)$. Магнитное поле в дальнейшем считается равным нулю, т.е. вычисляется дифференциальная магнитная восприимчивость в слабых полях. Это соответствует обычным экспериментальным условиям при измерении электронного парамагнитного резонанса. На рисунке 2 представлены результаты вы-

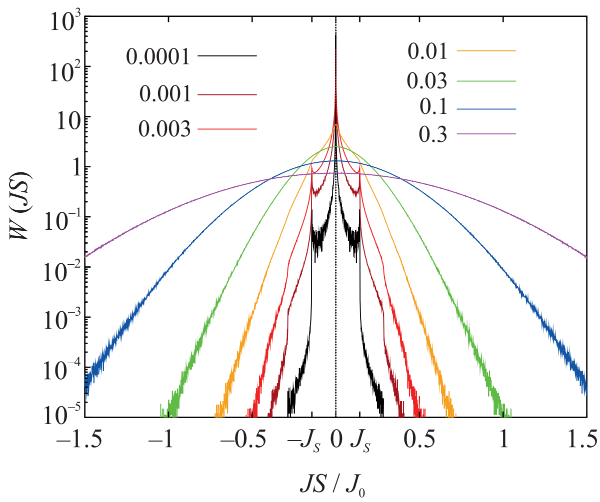


Рис. 2. (Цветной онлайн) Функция распределения обменной энергии $W(JS)$, вычисленная для системы неупорядоченных спинов при различных концентрациях примесных центров. Концентрация указана на рисунке в единицах $na^3$

числений функции $W(JS)$ для системы неупорядоченных спинов при различных концентрациях. При малых концентрациях функция распределения представляет собой острый максимум вблизи нуля, что объясняется быстрым затуханием функции $J(r/a)$ с расстоянием. Справа и слева от основного в распределении присутствуют боковые максимумы, соответствующие оптимальной энергии взаимодействия. Как было нами уже показано в [12], их энергия соответствует максимуму функции $4\pi(r/a)^2J(r/a)$, что для показателя степени предэкспоненциального множителя $5/2$ дает для оптимального расстояния значение $r = 5/4a$, а для оптимальной энергии $J_s = J(5/4a) = J_0(5/4)^{5/2}\exp(-2\cdot 5/4) \approx 0.143J_0$. Примечательно то, что энергия этих максимумов не зависит от концентрации. Спиновые состояния, находящиеся в максимумах, – это и есть та самая синглетная фаза Бхатта и Ли, возникающая в результате обменного взаимодействия при малых концентрациях. Количество спинов в синглетной фазе при увеличении концентрации постепенно возрастает, но общий вид функции не изменяется до тех пор, пока концентрация не приблизится к концентрации перехода металл-диэлектрик $na^3 \approx 0.01$.

При подходе концентрации к критической для обменной энергии $J_iS_i$ произвольного спина, являющейся согласно (3) просто суммой последовательности случайных величин, начинают выполняться условия центральной предельной теоремы. В сумме случайных величин накапливается необходимое число слагаемых и общий вид распределения $W(JS)$ становится гауссовым. Дальнейшее увеличение концентрации вида распределения не изменяет и приводит лишь к увеличению его дисперсии, которую легко можно вычислить аналитически, пользуясь тем, что $(J_iS_i)^2 = J_i^2$. Средний квадрат энергии обменного взаимодействия со спином, который находится внутри сферы радиуса $R$:

$$\sigma^2 = \frac{3}{4\pi R^3}\int\limits_0^R 4\pi r^2 J^2(r)dr = \frac{3J_0^2a^3}{R^3}\int\limits_0^{R/a} t^7\exp(-4t)dt. \tag{7}$$

При $R\to\infty$, интеграл в (7) равен

$$\int\limits_0^{+\infty} t^7\exp(-4t)dt = \frac{7!}{4^8}. \tag{8}$$

Количество спинов внутри сферы радиуса $R$ равно $N = 4/3\pi R^3 n$, откуда получаем выражение для среднеквадратичного отклонения обменной энергии:

$$\sigma^2 = \frac{7!}{4^7}\pi J_0^2 na^3. \tag{9}$$

Результаты численного моделирования для случая неупорядоченных спинов при высоких концентрациях идеально описываются гауссовым распределением с дисперсией, вычисленной согласно (9). Несложно вычислить и магнитную восприимчивость для системы неупорядоченных спинов с концентрацией, соответствующей этой, как мы будем ее называть, гауссовой фазе. Функция распределения обменной энергии в гауссовой фазе записывается в виде нормального распределения.

$$W\left(JS\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right). \tag{10}$$

Тогда, в соответствии с (6), магнитная восприимчивость будет равна:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi}\sigma kT}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right)\cosh^{-2}\left(\frac{JS}{kT}\right)d(JS). \tag{11}$$

Этот интеграл несложно взять численно, но для понимания того, как устроен ответ, полезно рассмотреть два предельных случая. В случае низких температур основной вклад в магнитную восприимчивость дают состояния с близкой к 0 обменной энергией. Поскольку $J \ll \sigma$,

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi}\sigma kT}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d(JS)}{\cosh^2(JS/kT)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{N\mu^2}{\sigma}. \tag{12}$$

Таким образом, при низких температурах магнитная восприимчивость не зависит от температуры и обратно пропорциональна стандартному отклонению обменной энергии $\sigma$. При высоких температурах $\cosh^2(JS/kT) \approx 1$, тогда для магнитной восприимчивости получаем

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi}\sigma kT}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right)d(JS) = \frac{N\mu^2}{kT}. \tag{13}$$

Таким образом, при высоких температурах для магнитной восприимчивости в гауссовой фазе получаем закон Кюри. Следует отметить, что для системы полностью неупорядоченных спинов знак взаимодействия не важен так как ориентация спинов случайна. Но, как будет показано ниже, поведение ферро- и антиферромагнитной системы спинов в состоянии минимума энергии резко различается.

На рисунках 3 и 4 приведены функции $W(JS)$, вычисленные для спиновой системы в состоянии с минимумом энергии для ферромагнитного и антиферромагнитного случаев. При малых концентрациях, т.е. в синглетной фазе, общий вид функции распределения, по сравнению со случаем полностью неупорядоченной системы, изменяется не очень сильно. Из качественных изменений можно отметить лишь появление по обеим сторонам от максимума дополнительных особенностей с энергией, равной $2J_s$, связанных, скорее всего, с образованием трехспиновых комплексов. При больших концентрациях, т.е. в гауссовой фазе, с функцией $W(JS)$ происходят качественные изменения. Распределение в виде сцентрированной на ноль энергии гауссианы распадается на два смещенных в разные стороны максимума, как для ферромагнитного случая, так и для антиферромагнитного.

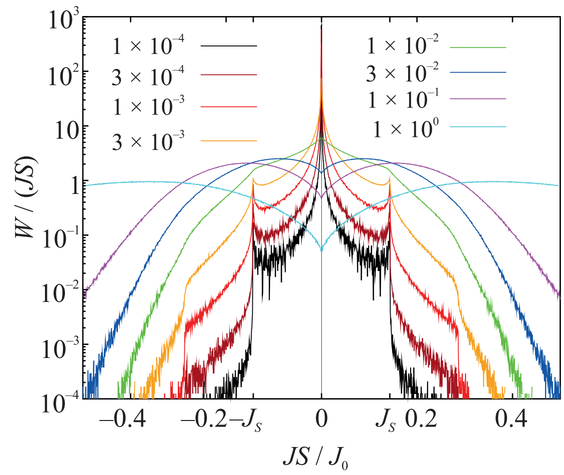


Рис. 3. (Цветной онлайн) Функция $W(JS)$ вычисленная для системы с антиферромагнитным взаимодействием в состоянии минимума энергии при различных концентрациях примесных центров

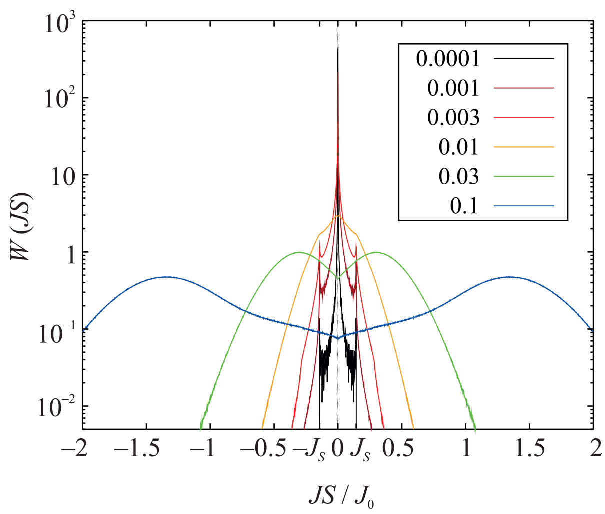


Рис. 4. (Цветной онлайн) Функция $W(JS)$, вычисленная для системы с ферромагнитным взаимодействием в состоянии минимума энергии при различных концентрациях примесных центров

Зависимость положения этих максимумов от концентрации для разных знаков взаимодействия различная. В случае антиферромагнитного взаимодействия положение максимумов ведет себя схоже со стандартным отклонением $\sigma$, т.е. растет как корень из концентрации, в согласии с (9). Несложно установить характер изменения положения максимума обменной энергии и для ферромагнитного случая. Пренебрежем границами между ферромагнитно ориентированными кластерами и предположим, что внутри одного кластера спины ориентированы в одну сторону, т.е., например, $J_iS_i = +1J_i$. Тогда флуктуации обменной энергии будут вызваны только случайным расположением спинов, а не их переворотами и среднее значение обменной энергии можно вычислить следующим образом.

$$\overline{J} = \frac{3}{4\pi R^3}\int\limits_0^R 4\pi r^2 J(r)dr = \\ = \frac{3J_0 a^3}{R^3}\int\limits_0^{R/a} t^{9/2}\exp(-2t)dt. \tag{14}$$

При $R \to \infty$ интеграл можно представить как

$$\int\limits_0^{+\infty} t^{9/2}\exp(-2t)dt = \frac{\Gamma(11/2)}{2^{11/2}} = \frac{945}{2^{10}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}. \tag{15}$$

В интеграле мы рассматривали взаимодействие с одним спином. Учтем то, что внутри сферы радиуса $R$ находится $N = 4/3\pi R^3 n$ спинов, тогда для среднего значения энергии обменного взаимодействия получаем

$$\overline{J} = \frac{945\pi}{2^8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}J_0 n a^3. \tag{16}$$

Вычисленные по этой формуле энергии хорошо совпадают с положением максимумов обменной энергии, вычисленных методом численного моделирования. Зависимость положения максимума обменной энергии от концентрации в этом случае — линейная.

Для того, чтобы убедится в том, что переход от синглетной к гауссовой фазе носит именно спин-флуктуационный характер в рамках той же методики нами были вычислены значения среднеквадратичного отклонения магнитного момента системы в состоянии минимума обменной энергии для ферро- и антиферромагнитного случаев в зависимости от концентрации примесей согласно формуле

$$\sqrt{\langle S^2\rangle} = \sqrt{\left\langle\left(\sum_N S_i\right)^2\right\rangle_K}. \tag{17}$$

Индекс $K$ соответствует усреднению по реализациям. Результаты этих вычислений вместе с приведенными ниже подгоночными функциями представлены на рис. 5. В обоих случаях наблюдается ярко выраженная картина изменения амплитуды спиновых флуктуаций при изменении концентрации. Для ферромагнитного случая величина среднеквадратичного отклонения в синглетной фазе немного превышает значение $\sqrt{N}$, равное среднеквадратичному отклонению для системы неупорядоченных спинов. При переходе в гауссову фазу происходит экспоненциальное $\sqrt{\langle S^2\rangle} \sim \exp(na^3/n_c a^3)$ увеличение магнитных

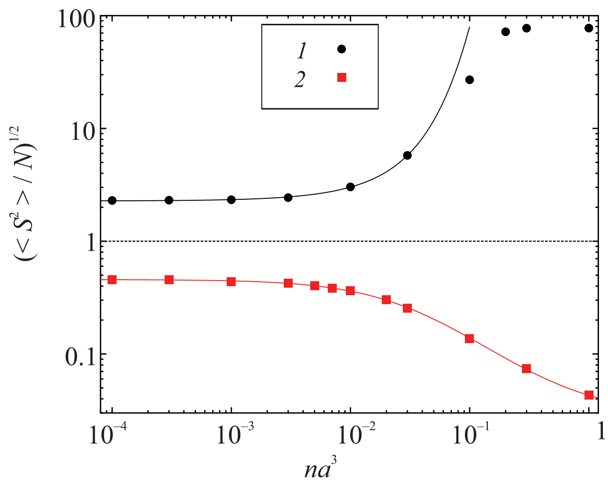


Рис. 5. (Цветной онлайн) Значение среднеквадратичного отклонения магнитного момента $\sqrt{\langle S^2\rangle}$ системы из $N$ спинов в состоянии минимума энергии для ферромагнитного (*1*) и антиферромагнитного (*2*) типов взаимодействия как функция концентрации примесей. Величина $\sqrt{\langle S^2\rangle}$ отнормирована на ее значение для неупорядоченной системы спинов, равное $\sqrt{N}$

флуктуаций, ограниченное лишь размерами системы. Для исследуемой системы из 6000 спинов в выбранной нормировке это $N/\sqrt{N} = \sqrt{6000} \approx 77.5$). В антиферромагнитном случае величина среднеквадратичного момента в синглетной фазе немного меньше $\sqrt{N}$. При переходе в гауссову фазу амплитуда магнитных флуктуаций уменьшается по закону $\sqrt{\langle S^2\rangle} \sim 1/(1 + na^3/n_c a^3)$. Значение критической концентрации для антиферромагнетика $n_c a^3 \approx \approx 0.035$, а для ферромагнетика $n_c a^3 \approx 0.025$, т.е. по порядку величины совпадает с критической концентрацией перехода металл-диэлектрик. Еще раз отметим, что значение среднего магнитного момента во всех случаях равно нулю и не меняется в течение всего спин-флуктуационного перехода при изменении концентрации как управляющего параметра.

Вычисление магнитной восприимчивости в зависимости от температуры в виде (6) с использованием вычисленных нами функций $W(JS)$ на самом деле не вполне корректно. Для получения точного вида магнитной восприимчивости необходимо знать функцию $W(JS)$ при любой температуре. Вычисления для случая полностью неупорядоченной системы спинов соответствуют бесконечной температуре, тогда как состояние минимума обменной энергии соответствует температуре, равной нулю. Но если предположить, что при температурах, меньших, чем характерная энергия флуктуаций обменной энергии, функция распределения обменного взаимодействия

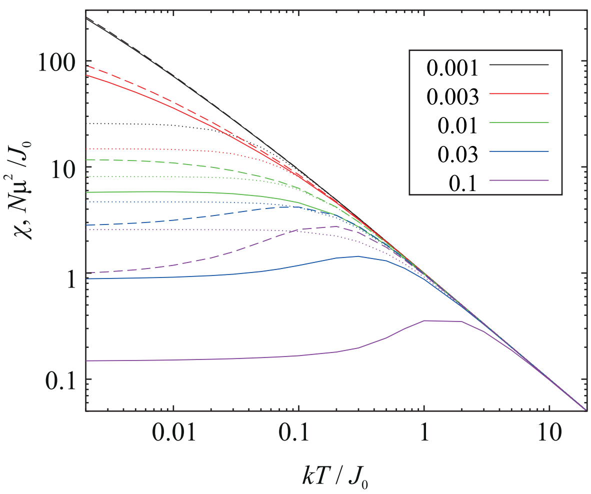


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости магнитной восприимчивости, вычисленные для спиновой системы, находящейся в состоянии минимума энергии. Пунктирные линии соответствуют системе с неупорядоченными спинами, штрихованные линии — антиферромагнитное упорядочение, сплошные линии — ферромагнитное. Концентрация в единицах $na^3$ указана на графике

изменяется слабо, расчет с использованием функции распределения, полученной для состояния в минимуме потенциальной энергии, можно использовать в качестве приближенного описания поведения магнитной восприимчивости.

На рисунке 6 приведены результаты этих вычислений. Как и следовало ожидать, при малых концентрациях, т.е. в синглетной фазе поведение магнитной восприимчивости для обоих знаков обменного взаимодействия качественно согласуется с расчетами, выполненными в работе Бхатта и Ли. В гауссовой фазе магнитная восприимчивость систем обоих знаков взаимодействия имеет максимум, что для неупорядоченных спиновых систем обычно считается признаком фазового перехода. В ферромагнитном случае магнитная восприимчивость заметно меньше, а температура максимума, заметно выше, чем в антиферромагнитном, что связано с большей средней обменной энергией ферромагнитных флуктуаций.

Итак, в работе исследованы магнитные свойства неупорядоченной системы примесных атомов, обменно взаимодействующих в рамках модели Изинга. Обнаружено, что при увеличении концентрации примесных атомов в такой системе происходит, так называемый, спин-флуктуационный переход, т.е. такой фазовый переход, в котором под воздействием управляющего параметра изменяется не средний магнитный момент, а амплитуда флуктуаций магнитного момента. Средний же магнитный момент системы равен нулю по обе стороны фазового перехода. Такой переход не может быть описан в рамках теории фазовых переходов Ландау или других теорий, являющихся ее развитием. Причиной этого, как нам кажется, является то, что теория Ландау тесно увязана с изменением симметрии системы. Фазовый переход в этой теории происходит из высокосимметричной фазы в фазу пониженной симметрии. Таким образом такая теория применима для систем с относительно высокой степенью симметрии, когда можно четко указать на ее изменение. Рассматриваемая система, состоящая из неупорядоченных в пространстве спинов, симметрична только относительно тождественного преобразования и не меняет эту симметрию при любой ориентации спинов. Однако, как показано в данной работе, если рассматривать в качестве параметра порядка флуктуации магнитного момента, даже в такой неупорядоченной системе можно выделить различные фазовые состояния и указать на фазовый переход между ними. Представляется важным то, что переход в представленной модели происходит при концентрациях, близких к наблюдаемым в экспериментах концентрациях перехода металл-диэлектрик в полупроводниках [14]. В этом случае большое значение приобретают детали обменного взаимодействия, выходящие за рамки водородоподобного приближения и связанные с конкретным видом примесных волновых функций [15–17]. Тогда, в зависимости от того, как устроено их обменное взаимодействие на микроскопическом уровне, спиновое упорядочение в полупроводниках может как наступать, так и не наступать. Вопрос о возможности спинового упорядочения с учетом степенного префактора в модели Гайзенберга пока остается открытым.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 19-02-00283.

1. Н. В. Агринская Н. Ю. Михайлин Д. В. Шамшур А. В. Шумилин, В. И. Козуб, ЖЭТФ **159**(5), 1 (2021).
2. A. Zabrodskii, A. Veinger, and P. Semenikhin, Appl. Magn. Reson. **51**(4), 327 (2020).
3. A. Zabrodskii, A. Veinger, and P. Semenikhin, Phys. Status Solidi B **257**(1), 1900249 (2020).
4. S. V. Demishev, Appl. Magn. Reson. **51**, 473 (2020).
5. A. V. Semeno, M. I. Gil'manov, N. E. Sluchanko, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, and S. V. Demishev, JETP Lett. **108**(4), 237 (2018).
6. С. В. Демишев, *II Конференция "Квантовые материалы и технологии на нанометровой шкале", Тезисы докладов*, **21**, ИОФ РАН, М. (2020).

7. J. Strečka and M. Jačšcur, Acta Phys. Slovaca **65**(4), 235 (2015).
8. S. V. Semkin, V. P. Smagin, and V. I. Lyul'ko, Phys. Solid State **62**(8), 1355 (2020).
9. R. N. Bhatt and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **48**, 344 (1982).
10. L. P. Gor'kov and L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. Doklady **8**, 788 (1964).
11. C. Herring and M. Flicker, Phys. Rev. **134**(2A), A362 (1964).
12. N. A. Bogoslovskiy, P. V. Petrov, and N. S. Averkiev, Phys. Solid State **61**(11), 2005 (2019).
13. M Saber, Chin. J. Phys. **35**(5), 577 (1997).
14. K. F. Berggren, Philos. Mag. **27**(5), 1027 (1973).
15. Н. С. Аверкиев, И. Н. Яссиевич, Ю. Т. Ребане, ФТП **19**, 96 (1985).
16. Н. С. Аверкиев, А. В. Родина, ФТТ **35**, 1051 (1993).
17. Н. С. Аверкиев, С. Ю. Ильинский, ФТТ **36**, 503 (1994).