

УДК 538.221:538.245

ТЕОРИЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНИТНОГО МЕТАЛЛА

А. В. Ведяев, Я. М. Нейматов

(кафедра магнетизма; ВНИИФТРИ)

Интерметаллические соединения РЗМ — переходный металл находят в последнее время все большую область практических применений [1]. Одним из наиболее важных примеров таких соединений является соединение SmCo_5 , на основе которого созданы постоянные магниты с рекордными значениями запасенной магнитной энергии. Следуя [2], для описания соединений РЗМ — $3d$ -металл можно использовать обобщенную модель, которая объединяет черты коллективизированного магнетика с прямым d — d -обменным взаимодействием и редкоземельного магнетика с локализованными спинами f -оболочек, взаимодействующими через механизм косвенного обмена [2]. Также был исследован спектр элементарных возбуждений в предложенной модели и рассмотрена температурная зависимость намагниченности насыщения при температуре, близкой к точке Кюри. Однако ранее не исследовалась температурная зависимость намагниченности при низких и промежуточных температурах, которая, как будет показано ниже, имеет характерные особенности, отличающие ее от температурной зависимости намагниченности в простых ферромагнетиках [3]. Причину этих особенностей можно понять из довольно простых физических соображений. Пусть в рассматриваемой обобщенной модели наиболее сильным взаимодействием, определяющим температуру Кюри T_K , является взаимодействие внутри системы d -электронов и величина обменного d — f -взаимодействия A много меньше температуры Кюри. Тогда при температурах, много меньших T_K и A/k_0 (k_0 — постоянная Больцмана), температурная зависимость намагниченности как d -, так и f -подсистем должна подчиняться закону « $T^{3/2}$ » Блоха. Но при температурах $T \approx A/k_0 \ll T_K$ температурная зависимость намагниченности f -подсистемы уже будет определяться молекулярным полем, действующим со стороны d -электронов, т. е. закон Блоха должен перестать действовать уже при температурах, значительно меньших T_K .

Запишем гамильтониан обобщенной модели ферромагнитного металла в следующем, предложенном в [2], виде:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{a}_{j\sigma} + V \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - g_f \mu_B H \sum_i \hat{S}_i^z - \\ & - g_d \mu_B H \sum_{i\sigma} \hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{\sigma}_z \hat{a}_{i\sigma} - 2A \sum_{i\sigma\sigma'} (\hat{S}_i \hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} \hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{a}_{i\sigma'}, \end{aligned} \quad (1)$$

где t_{ij} — матричный элемент перехода между узлами i и j , V — энергия кулоновского отталкивания d -электронов с противоположными спинами на одном узле, H — внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z , $\hat{\sigma}$ и $\hat{S}$ — операторы спина d -электрона и редкоземельного иона соответственно, A — интеграл d — f -обмена, g_d и g_f — факторы Ланде для d - и f -подсистем соответственно, μ_B — магнетон Бора, $\hat{a}_{i\sigma}^+$, $\hat{a}_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения d -электрона в узле i со спином σ , $\hat{n}_i$ —

оператор числа заполнения d -состояний в узле i , σ , σ' — спинные индексы, описывающие d -состояния.

Для расчета спектра элементарных возбуждений и намагниченности системы нам необходимо вычислить следующие поперечные спинные функции Грина [4]:

$$\begin{aligned} G_{\lambda\lambda'}(\tau) &= -i\Theta(\tau) \langle [\hat{S}_{\lambda}^+(\tau), \hat{S}_{\lambda'}^-(0)] \rangle, \\ \Gamma_{p\lambda\lambda'p'}(\tau) &= -i\Theta(\tau) \langle [\hat{a}_{p\uparrow}^+(\tau) \hat{a}_{\lambda\downarrow}(\tau), \hat{a}_{\lambda'\downarrow}^+(0) \hat{a}_{p'\uparrow}(0)] \rangle, \\ \Phi_{p\lambda\lambda'}(\tau) &= -i\Theta(\tau) \langle [\hat{a}_{p\uparrow}^+(\tau) \hat{a}_{\lambda\downarrow}(\tau), \hat{S}_{\lambda'}^-(0)] \rangle, \\ L_{\lambda\lambda'p'}(\tau) &= -i\Theta(\tau) \langle [\hat{S}_{\lambda}^+(\tau), \hat{a}_{\lambda'\downarrow}^+(0) \hat{a}_{p'\uparrow}(0)] \rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 1, & \tau > 0 \\ 0, & \tau < 0 \end{cases}$$

Составляя уравнения движения для функций Грина и используя приближение случайных фаз при расщеплении функций Грина высшего порядка, нетрудно найти явные выражения для фурье-образов функций Грина:

$$\begin{aligned} G_q(E) &= \frac{\mu_f}{2\pi(E - g_f\mu_B H - 2A\mu_d)} + \frac{2A^2\mu_f^2 R_q(E)}{\pi(E - g_f\mu_B H - 2A\mu_d)^2 [1 + Q(E) R_q(E)]}, \\ \Gamma_q(E) &= \frac{R_q(E)}{2\pi [1 + Q(E) R_q(E)]}, \\ \Phi_q(E) &= -L_q(E) = \frac{A\mu_f R_q(E)}{\pi(E - g_f\mu_B H - 2A\mu_d) [1 + Q(E) R_q(E)]}, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} R_q(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{n^\uparrow(k) - n^\uparrow(k-q)}{E + \varepsilon(k) - \varepsilon(k-q) - g_d\mu_B H - V\mu_d - 2A\mu_f}, \\ Q(E) &= V - \frac{4A^2\mu_f}{E - g_f\mu_B H - 2A\mu_d}, \end{aligned}$$

а μ_d и μ_f — относительные намагниченности d - и f -подсистем соответственно, $\varepsilon(k)$ — закон дисперсии d -электронов с импульсом k , $n(k)$ — функция распределения Ферми.

Спектр элементарных возбуждений определяется полюсами выражений (3):

$$1 + Q(E) R_q(E) = 0. \quad (4)$$

Заметим, что если положить V или A равными нулю, то уравнение (4) переходит в соответствующие уравнения, определяющие спектр спиновых волн в d -металле [5] или в РЗМ с s - f -обменом [6]. Мы далее будем рассматривать ситуацию, характерную для сплавов SmCo_5 , когда величину V можно считать значительно большей всех других характерных энергий в системе, в том числе интеграла d - f -обмена A . Тогда, решая уравнение (4), получим следующий спектр спиновых волн в системе, совпадающий с полученным в [2]:

$$E_{1q, (2q)} = \frac{1}{2} [2A(\mu_d + \mu_f) + \Omega_q] \pm \frac{1}{2} \{ [2A(\mu_d + \mu_f) - \Omega_q]^2 + 8A\mu_f\Omega_q \}^{1/2}, \quad (5)$$

где

$$\Omega_q = \frac{1}{\mu_d} \sum_k \frac{1}{2} [n^\dagger(k) + n^\dagger(k)] (q \nabla_k)^2 \varepsilon_k - \frac{1}{V \mu_d^2} \sum_k [n^\dagger(k) - n^\dagger(k)] (q \nabla_k \varepsilon_k)^2. \quad (6)$$

$E_{1q(2q)}$ соответствует акустической (оптической) ветви спектра элементарных возбуждений в системе.

Для расчета намагниченностей в d - и f -подсистемах μ_d и μ_f воспользуемся флуктуационно-диссипативной теоремой [5]. Тогда получим следующие соотношения:

$$\mu_d = \frac{1}{N} \sum_k [n^\dagger(k) - n^\dagger(k)] + \frac{2}{\pi N} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im} \chi_q^d(E)}{i^{\beta E} - 1} dE, \quad (7)$$

$$\mu_f = 1 + \frac{1}{\pi N} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im} \chi_q^f(E)}{i^{\beta E} - 1} dE, \quad (8)$$

где $\chi_q^d(E) = 2\pi \Gamma_q(E)$ и $\chi_q^f(E) = 2\pi G_q(E)$ динамические восприимчивости d - и f -подсистем соответственно, а $\beta = 1/k_0 T$.

Воспользовавшись выражениями (3) и используя решение уравнения (4), можно записать (7) и (8) в следующем виде:

$$\mu_d = \frac{1}{N} \sum_k [n^\dagger(k) - n^\dagger(k)] - \frac{2V\mu_d}{N} \left[\sum_q \frac{R_q(E_{2q})(E_{2q} - 2A\mu_d)}{(E_{1q} - E_{2q})(i^{\beta E_{2q}} - 1)} - \sum_q \frac{R_q(E_{1q})(E_{1q} - 2A\mu_d)}{(E_{1q} - E_{2q})(i^{\beta E_{1q}} - 1)} \right], \quad (9)$$

$$\mu_f = 1 - \frac{8A^2\mu_f^2 V \mu_d}{N} \left[\sum_q \frac{R_q(E_{2q})}{(E_{1q} - E_{2q})(E_{2q} - 2A\mu_d)(i^{\beta E_{2q}} - 1)} - \sum_q \frac{R_q(E_{1q})}{(E_{1q} - E_{2q})(E_{1q} - 2A\mu_d)(i^{\beta E_{1q}} - 1)} \right]. \quad (10)$$

Исследуем явный вид температурной зависимости намагниченностей μ_d и μ_f в следующих предельных случаях.

$$1) T \ll \frac{2A\mu_d}{k_0}.$$

Тогда из (9) и (10) нетрудно получить

$$\mu_d = \mu_0 - \frac{q_{\max}^3 \Omega_0 \zeta\left(\frac{3}{2}\right) V \mu_d^3}{4(\mu_d + \mu_f)(V \mu_d + 2A\mu_f)} \left(\frac{k_0 T}{\pi \alpha_0}\right)^{3/2}, \quad (11)$$

$$\mu_f = 1 - \frac{q_{\max}^3 \Omega_0 \zeta\left(\frac{3}{2}\right) V \mu_d \mu_f^2}{4(\mu_d + \mu_f)(V \mu_d + 2A\mu_f)} \left(\frac{k_0 T}{\pi \alpha_0}\right)^{3/2}, \quad (12)$$

где μ_0 — относительная намагниченность d -подсистемы при $T=0$; α_0 — постоянная порядка температуры Кюри, $\zeta(3/2)$ — дзета-функция Римана, $q_{\max}$ — максимальный импульс спиновой волны, Ω_0 — объем элементарной ячейки.

$$2) \frac{2A\mu_d}{k_0} \ll T \ll T_K.$$

При этом будем иметь

$$\mu_d = \mu_0 - \frac{1}{4} q_{\max}^3 \Omega_0 \left(\frac{k_0 T}{\pi D_0} \right)^{3/2}, \quad (13)$$

$$\mu_f = \text{th} \frac{A\mu_d}{k_0 T}, \quad (14)$$

где D_0 — постоянная порядка температуры Кюри.

Таким образом, из выражений (11) — (14) видно, что в рассматриваемой модели помимо температуры Кюри появляется еще одна характерная температура $T^* = A\mu_d/k_0$. Температурная зависимость намагниченностей для обеих подсистем при $T \ll T^*$ подчиняется закону « $T^{3/2}$ » Блоха, а при $T \approx T^* \ll T_K$ температурная зависимость намагниченности f -подсистемы определяется молекулярным полем, действующим со стороны d -подсистемы, т. е. отклонения от закона « $T^{3/2}$ » должны проявляться при температурах, значительно меньших температуры Кюри.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Тейлор К. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов. М., 1974, 374 с. [2] Бердышев А. А., Летфулов Б. М. Обобщенная модель ферромагнитного металла. — Физ. мет. и металловедение, 1974, 37, с. 427—429. [3] Тяблицов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1975, с. 262. [4] Зубарев Д. Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике. — Успехи физ. наук, 1960, 71, с. 71—117. [5] Уайт Р. М. Квантовая теория магнетизма. М., 1972, с. 27. [6] Изюмов Ю. А., Кассан-Оглы Ф. А., Скрыбин Ю. Н. Полевые методы в теории ферромагнетизма. М., 1974, с. 142.

Поступила в редакцию
12.03.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 2

УДК 539.293.011.2

О ПРОИСХОЖДЕНИИ ГЛАДКОГО СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В. Л. Бонч-Бруевич

(кафедра физики полупроводников)

Модель гладкого случайного поля, предложенная в работе [1], позволила дать теоретическую трактовку ряда явлений, наблюдаемых в неупорядоченных полупроводниках [2—15]. В частности, таким путем удается объяснить возникновение «хвоста» коэффициента поглощения света при низких температурах («правило Урбаха»). Удобство этой модели состоит в том, что гладкость поля оправдывает квазиклассический метод расчета плотности состояний, комплексной электропроводности и т. д., причем свойства случайного поля характеризуются лишь небольшим числом параметров. Так, в макроскопически изотропном и однородном гауссовом поле их два: $\psi_1 = \langle V^2 \rangle$, $\psi_2 = \frac{1}{2} \langle (\nabla V)^2 \rangle$. Здесь угловые скобки обозначают усреднение по случайному полю, V — потенциальная энергия электрона в нем, нормированная так, что $\langle V \rangle = 0$. Аналогично обстоит дело и в негауссовых полях [16].