СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. [2] Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. [3] Богданов В. Н., Рыскин С. Е. Применение сквозного индукционного нагрева в промышленности. М.—Л.: Машиностроение, 1965. [4] Теплофизические свойства веществ. / Под ред. Н. Б. Варгафтика. М.—Л., Госэнергоиздат, 1956. [5] Гласко В. Б., Кулик Н. И. и др. ЖВМ и МФ, 1979, 9, № 3, с. 768. [6] Гласко В. Б., Кулик Н. И., Шкляров И. Н. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Выч. матем. и кибернетика, 1978, № 1, с. 36. [7] Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972.

Поступила в редакцию
12.12.80

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 5

УДК 539.2.01:537.312.62

О ХАРАКТЕРЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СОЕДИНЕНИЯХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

А. В. Ведяев, М. А. Савченко, Л. В. Панина

(кафедра магнетизма)

Введение. В последнее время проводятся исследования соединений типа $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$. В работе [1] приводится экспериментальная фазовая диаграмма таких соединений (рис. 1), наиболее характерной чертой которой является наличие критической концентрации. Пока еще экспериментально не установлено, есть ли в квазитройных соединениях фаза сосуществования сверхпроводимости и магнетизма. Однако

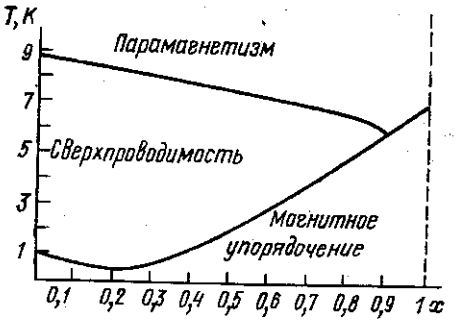

Рис. 1. Экспериментальная фазовая диаграмма соединений типа $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$

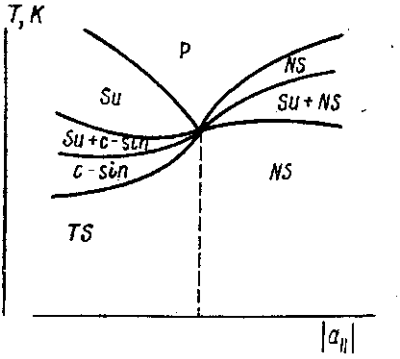

Рис. 2. Теоретическая фазовая диаграмма соединений типа $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$: фазы скошенной (TS) и нормальной (NS) спирали, сверхпроводимости (Su), парамагнетизма (P); волна спиновой плотности (c — sin)

сравнение экспериментов по измерению магнитной восприимчивости и теплоемкости для соединения $ErRh_4B_4$ приводит к выводу о наличии такой фазы в узкой области температур ($\Delta T \approx 0{,}05$ K) [2, 3].

Флуктуационная теория фазовых переходов в соединениях типа $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$ была развита в работах [4—6]. Авторы построили фазовую диаграмму в переменных температура — анизотропия (рис. 2).

Мы исследуем сверхпроводящее состояние и полученную теоретически в [4—6] фазу сосуществования сверхпроводимости и магнетизма и покажем, что учет магнитных флуктуаций приводит к вихревой

структуре. Переходы в неоднородные состояния оказываются переходами первого рода, близкими ко второму.

В настоящее время нет достаточно убедительных экспериментальных фактов, подтверждающих наличие фазовых переходов в сверхпроводящем состоянии, хотя на кривых зависимости теплоемкости от температуры, приведенных в работах [7—8], наблюдается серия небольших пиков.

Структура неоднородного сверхпроводящего состояния. Магнитные флуктуации существуют во всех фазах сверхпроводящих соединений редкоземельных металлов, рассмотренных в работах [4—6]. Учет магнитных флуктуаций приводит к вихревой структуре, отличной от структуры в обычном сверхпроводнике второго рода.

Представление о возможных неоднородных состояниях может быть получено из анализа свободной энергии системы, при этом используется калибровка полей Янга — Миллса [9], поскольку спиновая система учитывается как внутренняя степень свободы. Тогда сверхпроводящий параметр порядка Ψ оказывается тензорной величиной.

Термодинамический потенциал системы может быть записан в виде

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} b_1(\tau) \operatorname{Sp}(\Psi^* \Psi) + b_\nu(\tau) \operatorname{Sp}[\Psi (D_\nu \Psi)^* - \Psi^* (D_\nu \Psi)] + \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \operatorname{Sp}[(D_\nu \Psi)^* D_\nu \Psi] +$$

$$\left. + b_2(\tau) \operatorname{Sp}(\Psi^* \Psi)^2 \ln \left[\frac{1}{b_3(\tau)} \operatorname{Sp}(\Psi^* \Psi) \right] + \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^2 \right\}. \qquad (1)$$

В (1) возникновение второго члена связано с тем, что сверхпроводящая структура обладает эффективным волновым вектором. Логарифмическая особенность свидетельствует о сильной связи параметра порядка с магнитными флуктуациями, при которой возникает обмен энергиями между подсистемами. Здесь $F^\alpha{}_{\mu\nu}$ — тензор напряженности поля Янга — Миллса;

$$F_{\mu\nu}^\alpha = \nabla_\nu A_\mu^\alpha - \nabla_\mu A_\nu^\alpha + g e^{\alpha\beta\gamma} A_\nu^\beta A_\mu^\gamma,$$

D_ν — ковариантная производная, которая в данном случае записывается в виде $D_\nu = \nabla_\nu - \frac{i}{2} g \tau^\alpha A_\nu^\alpha$, τ^α — матрицы Паули. Поскольку рассматривается структура неоднородного сверхпроводящего состояния, термодинамический потенциал системы имеет особенности. Мы исследуем линейные особенности, при этом параметр порядка Ψ ищем в виде

$$\Psi = u(\rho)\, e^{i\xi(\rho)(\tau\mathbf{n})} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \Psi^0 e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}};$$

$$\mathbf{n} = (\cos n\varphi,\ \sin n\varphi,\ 0),\ n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (2)$$

Величина волнового вектора $\mathbf{q}$ определяется из минимума свободной энергии

$$q_\nu = 2ib_\nu(\tau).$$

Поле $A_\nu^\alpha(r)$ будем искать в виде

$$A_\nu^\alpha(r) = a(\rho)\, e_{\alpha\beta\gamma} n^\beta \nabla_\nu n^\gamma, \qquad (3)$$

где ρ — расстояние от оси линейной особенности. Тогда можно выписать тензор напряженности поля Янга — Миллса

$$F_{\mu\nu} = (\nabla_\nu a)\,[\mathbf{n}\times\nabla_\mu \mathbf{n}] - (\nabla_\mu a)\,[\mathbf{n}\times\nabla_\nu \mathbf{n}] - \\ - 2\,[\nabla_\mu \mathbf{n}\times\nabla_\nu \mathbf{n}]\,a + ga^2\,\mathbf{n}\,(\mathbf{n}\,[\nabla_\mu \mathbf{n}\times\nabla_\nu \mathbf{n}]).$$

Общее выражение для тензора «тока» имеет вид

$$I^\alpha_\nu = \frac{\delta F}{\delta A^\alpha_\nu} = -\frac{i}{4}\,g\,\mathrm{Sp}\,(\nabla^*_\nu \Psi^*_0 \tau^\alpha \Psi_0 - \Psi^*_0 \tau^\alpha \nabla_\nu \Psi_0) + \\ + \frac{1}{4}\,g^2 A^\alpha_\nu\,\mathrm{Sp}\,(\Psi^*_0 \Psi_0).$$

Используя формулы (3), (2), получим

$$I^\alpha_\nu = \frac{1}{2}\,gu^2\,[-(\nabla_\nu \xi)\,n^\alpha - \sin\xi\cdot\cos\xi\,(\nabla_\nu n^\alpha) + \\ + \sin^2\xi\cdot e_{\alpha\beta\gamma}\,n^\beta \nabla_\nu n^\gamma] + \frac{1}{4}\,g^2u^2 a e_{\alpha\beta\gamma}\,n^\beta \nabla_\nu n^\gamma.$$

Минимизируя термодинамический потенциал по ξ и вводя граничные условия для «тока»

$$I^\alpha_\nu(0) \to 0,\quad I^\alpha_\nu(|\mathbf{r}| \to \infty) \to 0,$$

можно получить уравнение для функции $\chi = 2\xi$:

$$\Delta\chi - \frac{n^2}{\rho^2}\sin\chi = 0, \quad \sin\xi = \frac{1}{\mathrm{ch}\,[n\ln(\rho/\rho_0)]}. \tag{4}$$

Решение уравнения (4) представляет солитон, размер которого $L \sim \rho_0$. Используя (4), выпишем систему уравнений для функций $u(\rho)$, $a(\rho)$:

$$u'' + \frac{1}{\rho}u' - \tilde{b}_1(\tau)\,u - 4\,b_2(\tau)\ln\frac{u^2}{b_3(\tau)} - \\ - 2b_2(\tau)\,u^3 - \frac{2n^2u}{\rho^2\,\mathrm{ch}^2\,[n\ln(\rho/\rho_0)]} - \\ - g\,\frac{n^2ua}{\rho^2\,\mathrm{ch}^2\,[n\ln(\rho/\rho_0)]} - \frac{1}{4}\,g^2\,n^2/\rho_0^2\,ua^2 = 0; \tag{5}$$

$$a'' - \frac{1}{\rho}a' - \frac{1}{4}\,g^2u^2\left(a + \frac{2}{g\,\mathrm{ch}^2\,[n\ln(\rho/\rho_0)]}\right) = 0,$$

$$\tilde{b}_1(\tau) = b_1(\tau) + 4\sum_\nu b^2_\nu(\tau).$$

Асимптотики решений имеют вид:

$$1.\ \rho \to 0;\ u \to \rho;\ a \to \rho^2; \tag{6}$$

$$2.\ \rho \to \infty,\ u \to u_\infty,\ a \to e^{-\rho/\tilde{\rho}_0}\,(\rho/\tilde{\rho}_0)^{1/2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{2^m}{m!\,(\rho/\tilde{\rho}_0)^m},\ \tilde{\rho}_0 = \frac{2}{gu_\infty}.$$

Анализ системы уравнений (5) показывает, что в неоднородной сверхпроводящей фазе существуют два типа линейных особенностей.

Первому типу соответствует n целое, второму — n полуцелое. В первом случае имеем квантованные вихри, во втором — «сверхпроводящие дисклинации».

Вычислим квант потока такого вихря (рис. 3):

$$\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{4|e|} \frac{\rho_0}{R_0} \approx 10^{-7}\ \text{г}\cdot\text{см}^2.$$

Квант потока для нелинейного вихря оказывается такого же порядка, как и для обычного сверхпроводника второго рода. Множитель ρ_0/R_0 отражает влияние нелинейностей.

Исследование фазовых переходов в найденные неоднородные состояния (5) проводится методом, развитым в работах [4—6]. Вводятся тензоры плотности вихрей двух типов $\hat{\rho}_1[n=k]$ и $\hat{\rho}_2[n=k/2]$, соответствующие двум типам линейных особенностей. Применяя формализм ренормализационной группы, получим, что линии фазовых переходов в эти состояния оказываются линиями переходов первого рода, близкого ко второму.

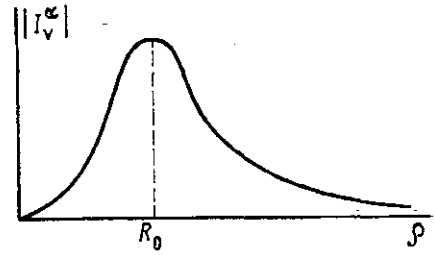

Рис. 3. Распределение $|I_\nu^\alpha|$ относительно оси линейной особенности

Фаза сосуществования сверхпроводимости и магнетизма. Из рассмотрения фазовой диаграммы соединений $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$ следует, что термодинамически устойчивой может быть фаза сосуществования сверхпроводимости с синусоидальной волной спиновой плотности.

Так как в системе есть магнитное упорядочение, структура фазы сосуществования будет вихревой. Поэтому можно воспользоваться развитым здесь формализмом; при этом свободная энергия запишется в виде

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} b_1(\tau)\,\mathrm{Sp}(\Psi^*\Psi) + b_\nu(\tau)\,\mathrm{Sp}[\Psi(\mathcal{D}_\nu\Psi)^* - \Psi^*(\mathcal{D}_\nu\Psi)] + \right.$$
$$+ \frac{1}{2}\mathrm{Sp}[(\mathcal{D}_\nu\Psi)^*(\mathcal{D}_\nu\Psi)] + b_2(\tau)\,\mathrm{Sp}(\Psi^*\Psi)^2 \ln\frac{\mathrm{Sp}(\Psi^*\Psi)}{b_3(\tau)} +$$
$$+ a_\nu(\tau)\,[\mathbf{S}_\parallel(D_\nu S_\parallel)^* - \mathbf{S}_\parallel^*(D_\nu \mathbf{S}_\parallel)] +$$
$$+ \frac{1}{2}[(D_\nu \mathbf{S}_\parallel)^* D_\nu \mathbf{S}_\parallel] + a_2(\tau)(\mathbf{S}_\parallel \mathbf{S}_\parallel^*)^2 \ln\frac{(\mathbf{S}_\parallel \mathbf{S}_\parallel^*)}{a_3(\tau)} +$$
$$\left. + A(\tau)(\mathbf{S}_\parallel \mathbf{S}_\parallel^*)\,\mathrm{Sp}(\Psi^*\Psi) + \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^2 \right\}.$$

Ковариантные производные $\mathcal{D}_\nu$ и D_ν определяются следующим образом:

$$\mathcal{D}_\nu = \nabla_\nu - \frac{i}{2} g\,\tau^\alpha A_\nu^\alpha;$$

$$D_\nu = \nabla_\nu - g\,e_{\alpha\beta\gamma} A_\nu^\alpha.$$

В фазе сосуществования возникает суперпозиция сверхпроводящей волновой структуры, задаваемой параметром порядка $\Psi = \Psi_0 e^{iq_\delta \mathbf{r}}$ и синусоидальной волной спиновой плотности $\mathbf{S}_\parallel = \mathbf{S}_{\parallel 0} e^{iq_\parallel \mathbf{r}}$, где

$$q_{\delta\nu} = 2ib_\nu(\tau),\ q_{\parallel\nu} = 2ia_\nu(\tau).$$

Поскольку из экспериментальных данных [2—3] известно, что фазе сосуществования сверхпроводимости и магнетизма отвечает структура с фиксированной длиной волны ($\lambda \approx 100$ Å), то мы положим $q_{\delta\nu} = q_{\parallel\nu}$. Так как магнитная подсистема обладает сильной анизотропией, то в дальнейшем будем считать, что $\mathbf{S}_{\parallel 0} = (0, 0, s_{\parallel 0})$; рассматриваем по-прежнему линейные особенности, тогда параметр порядка Ψ_0 и поле A_ν^a будем искать в виде (2), (3). Функции u, a, $s_\parallel$ являются функциями расстояния от оси линейной особенности. Система уравнений для определения u, a, $s_\parallel$ может быть получена аналогично (5):

$$u'' + \frac{1}{\rho} u' - \tilde{b}_1(\tau) - 4 b_2(\tau) u^3 \ln [u^2/b_3(\tau)] -$$

$$- 2b_2(\tau) u^3 - 2A(\tau) u s_\parallel^2 - \frac{2n^2 u}{\rho \operatorname{ch}^2 [n \ln (\rho/\rho_0)]} -$$

$$- \frac{gn^2 ua}{\rho^2 \operatorname{ch}^2 [n \ln (\rho/\rho_0)]} - \frac{1}{4} g^2 \frac{n^2}{\rho^2} ua^2 = 0. \qquad (7)$$

$$s_\parallel'' - \frac{1}{\rho} s_\parallel' - a_1(\tau) s_\parallel - 4a^2(\tau) s_\parallel^3 \ln [s_\parallel^2/a_3(\tau)] -$$

$$- 2a_2(\tau) s_\parallel^3 - 2A(\tau) s_\parallel u^2 = 0,$$

$$a'' - \frac{1}{\rho} a' - \frac{1}{4} g^2 u^2 \left(a + \frac{2}{g \operatorname{ch}^2 [n \ln (\rho/\rho_0)]} \right) = 0.$$

Асимптотики имеют вид:

1. $\rho \to 0$, $u \to \rho$, $s_\parallel \to \rho$, $a \to \rho^2$;
2. $\rho \to \infty$, $u \to u_\infty$, $s_\parallel \to s_{\parallel\infty}$;

$$a \to \left(\frac{\rho}{\tilde{\rho}_0} \right) f \left(\frac{\rho}{\tilde{\rho}_0} \right) e^{-\rho/\tilde{\rho}_0}; \qquad (8)$$

$$f(x) = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\Gamma(2l+1)}{\Gamma(l+1)\Gamma(l+3) x^l}; \quad \tilde{\rho}_0 = \frac{2}{gu_\infty}.$$

Из сравнения (7)—(8) и (5)—(6) следует, что линейная особенность в фазе сосуществования по симметрии сверхпроводящей составляющей не отличается от линейной особенности неоднородной сверхпроводящей фазы. Это является следствием того, что взаимодействие сверхпроводящей и магнитной подсистем слабое, поскольку магнитная подсистема не взаимодействует с полем.

Заключение. В работе исследована вихревая структура сверхпроводящего состояния, вычислен квант потока вихря, который оказался того же порядка, как и квант вихря Абрикосова. Указано на вероятность возникновения в сверхпроводящем состоянии фазовых переходов, связанных с изменением сверхпроводящей структуры.

На основе развитого формализма рассмотрена фаза сосуществования сверхпроводимости и магнетизма с учетом магнитных флуктуаций. Показано, что магнитные флуктуации в основном определяют род перехода из одного упорядоченного состояния в другое.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Johnston D. C., Fertig W. A. et al. Solid State Comm., 1978, 26, p. 141. [2] Fertig W. A., Johnston D. C., Delong L. E. Solid State Comm., 1977, 39, p. 987. [3] Monston D. E. J. Appl. Phys., 1979, 50, p. 1880. [4] Савченко М. А., Стефанович А. В. Письма в ЖЭТФ, 1979, 29, с. 132. [5] Савченко М. А., Стефанович А. В. Письма в ЖЭТФ, 1979, 29, с. 661. [6] Савченко М. А., Стефанович А. В. Физ. мет. и металловедение, 1980, 47, с. 1011. [7] Woolf L. D., Johnston D. C. et al. J. Low Temp. Phys., 1979, 35, p. 651. [8] Maple M. B., Hamaker H. C. et al. J. Less-Common Met., 1978, 62, p. 251. [9] Yang C. N., Mills R. G. Phys. Rev., 1954, 96, p. 191.

Поступила в редакцию
19.03.81

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 5

УДК 546.3

ЛОКАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ЖЕЛЕЗА В α- И β-МОДИФИКАЦИЯХ МАРГАНЦА

А. С. Илюшин, И. А. Никанорова

(кафедра физики твердого тела)

Среди переходных металлов особое место принадлежит марганцу, который, несмотря на простую электронную конфигурацию наполовину заполненного $3(d)$-уровня, может существовать в четырех аллотропных модификациях: α, β, γ и δ. Кристаллические структуры α- и β-модификаций достаточно сложны и не встречаются у других металлов [1, 2]. Согласно [1], кристаллическая структура α-Mn относится к пространственной группе $I\bar{4}3m$—T_d^3, и его элементарная ячейка с параметром $a=8{,}912$ Å насчитывает 58 атомов, занимающих четыре структурно-неэквивалентных положения: $2Mn^{(1)}$ в $2(a)$; $8Mn^{(2)}$ в $8(c)$ с $x=0{,}317$; 24Mn в $24(g_1)$ с $x=0{,}356$; $z=0{,}042$; 24Mn в $24(g_2)$ с $x=0{,}089$, $z=0{,}278$. Структура β-Mn характеризуется пр. гр. $P4_13$—O_h^7, и его элементарная ячейка с параметром $a=6{,}303$ Å содержит 20 атомов в двух структурно-неэквивалентных положениях: $8Mn^{(1)}$ в $8(c)$ с $x=0{,}061$ и $12Mn^{(2)}$ в $12(d)$ с $x=0{,}206$ [2].

Проведенный в работе [3] анализ показал, что α- и β-модификации марганца родственны друг другу в отношении координации атомов, причем для α-Mn характерны координационные числа (к. ч.) 12, 13 и 16, а для β-Mn к. ч. равны 12 и 14. Координационный многогранник для атома с к. ч., равным 12, представляет собой икосаэдр, идентичный для α- и β-модификаций. Можно считать, что в этих модификациях общим является и второй многогранник — четырнадцативершинник в β-Mn и тринадцативершинник с одним дополнительным атомом в структуре α-Mn.

Известно [4], что α- и β-модификации марганца могут растворять до ~33 ат.% железа с образованием непрерывных твердых растворов замещения. Наличие в структурах α- и β-Mn структурно-неэквивалентных положений позволяет предположить неравномерное распределение атомов железа по этим положениям, однако из-за малой разницы в рассеивающих способностях атомов Mn и Fe экспериментальное изучение этого явления традиционными рентгеновскими методами затруднительно. Развитая в работах [5, 6] методика позволяет с помощью ядерного гамма-резонанса (ЯГР) изучать локальное распре-