Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.6, стр.317 - 321 25 сентября 1992 г.

АНОМАЛИИ РЕШЕТОЧНЫХ СВОЙСТВ ЗОННЫХ МАГНЕТИКОВ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ОСОБЕННОСТЯМИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

*В.Ю.Ирхин, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов**

Институт физики металлов, Уральское отделение РАН
620219, Екатеринбург, Россия
** Российский научный центр "Курчатовский институт"*
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 августа 1992 г.

Показано, что особенности электронной структуры зонных магнетиков вблизи уровня Ферми играют существенную роль в магнитообъемных и магнитоупругих аномалиях. Даны явные выражения для соответствующих вкладов в коэффициент теплового расширения и модули упругости. Предложено объяснение аномалий, наблюдаемых в $ZrZn_2$ и Cr.

Проблема аномалий решеточных свойств ферро- и антиферромагнетиков (ФМ и АФМ) привлекает большое внимание как в связи с важностью для понимания природы магнетизма конкретных систем (адекватность локализованной или коллективизированной картины), так и в связи с практическими применениями (инварные и элинварные сплавы) [1,2]. Существующие подходы к описанию этих аномалий [1,3,4] не учитывают двух важных обстоятельств: существенного значения деталей электронной структуры вблизи уровня Ферми E_F (особенностей ван Хова, ОВХ, в плотности состояний $N(E)$) для магнетизма [5,6] и определяющей роли этих деталей в формировании особенностей фононных спектров и решеточных свойств [7,8]. В настоящей работе впервые показано, что в слабых зонных ФМ типа $ZrZn_2$, MnSi, Ni_3Al и АФМ (хром) аномалии температурных зависимостей коэффициента теплового расширения $\beta(T)$ и модулей упругости $C_{ij}(T)$ обусловлены особенностями их электронной структуры.

Необходимой предпосылкой возникновения ферромагнетизма в d-металлах и сплавах (исключая узкозонные ФМ типа $Fe_{1-x}Co_xS_2$) является близость E_F к пику N(E) в парамагнитной фазе. В типичных ситуациях (включая приближение свободных электронов) такие пики возникают при слиянии двух трехмерных корневых ОВХ, которые связаны с критическими точками, лежащими на некоторой линии l [9] (в железе l – это линия PN [6]). Тогда пик $N(E)$ имеет вид эффективной двумерной ОВХ: $\delta N(E) \sim -\ln|E-E_c|$ [9]. Если в парамагнитной фазе $\eta = E_c - E_F$ мало, выполняется стонеровское условие ферромагнетизма. В рамках стонеровской картины в ФМ фазе электронный спектр расщепляется на $\Delta = IM(T)$, где M – намагниченность, I – параметр Стонера. Для магнетиков с хорошо определенными локальными моментами с амплитудой S_L имеем $\Delta = IS_L(T)$ [10]. В любом случае можно считать, что особенность E_c расщепляется на две, отстоящие от E_F на $\eta_\pm = \eta \pm \Delta/2$, причем форма пиков $N(E)$ не меняется. Тогда с изменением температуры особенности смещаются благодаря зависимости $\Delta(T)$. Виртуальные переходы с пиков на уровень Ферми и обратно приводят к аномалиям в поляризационном операторе и динамической матрице $D_{\alpha\beta}(\mathrm{q})$ (q – волновой вектор фонона), а следовательно в фононной части свободной энергии F_{ph} и в решеточных свойствах [7,8]. Виртуальные переходы между пиками со спином вверх и спином вниз можно не учитывать в меру малости спин-орбитального взаимодействия (исключая тем самым из рассмотрения, например, актинидные системы).

Аномальные вклады в решеточные свойства при $\eta \to 0$ были найдены [8] в модели почти свободных электронов для обычной корневой ОВХ. Поскольку в рассматриваемом случае энергия постоянна вдоль линии l, существенна лишь дисперсия в перпендикулярном направлении, и мы исследуем двумерный случай, что соответствует эффективной логарифмической ОВХ в трехмерных системах. Для определенности будем считать, что l лежит на границе зоны Бриллюэна (это выполняется как для Fe [6], так и для $ZrZn_2$ [5]). Тогда, как показано в [8], наиболее сингулярные вклады в динамическую матрицу не зависят от q:

$$D^{\mathrm{sing}}_{\alpha\beta} = -\frac{1}{M} g_\alpha g_\beta |V(\mathbf{g})|^2 (\Pi^{\mathrm{sing}}_{\mathbf{g},\mathbf{g}} - \Pi^{\mathrm{sing}}_{\mathbf{g},-\mathbf{g}}), \tag{1}$$

где M – масса иона, g – вектор обратной решетки для заданной грани, $V(g)$ – фурье-компонента кристаллического потенциала, $\hat{\Pi}$ – поляризационный оператор. Выделяя сингулярности в

$$F_{ph} = T \sum_{\mathbf{q}\nu} \ln\left(2\mathrm{sh}\frac{\omega_{\mathbf{q}\nu}}{2T}\right) \tag{2}$$

($\omega_{\mathbf{q}\nu}$ – фононный спектр), находим аномальные вклады в

$$\beta_{ph}(T) = \frac{\partial^2 F_{ph}}{\partial T \partial P}, \qquad C^{ph}_{ij}(T) = \frac{1}{\Omega}\frac{\partial^2 F_{ph}}{\partial u_i \partial u_j}, \tag{3}$$

где Ω – атомный объем, P – давление, u_i – параметры деформации. Электронные вклады β^e и C^e_{ij} могут быть выражены как непосредственно через $N(E)$, так и через $\hat{\Pi}$ [8].

В простейшей двухволновой модели, учитывающей смешивание электронных состояний $|\mathbf{k}>$ и $|\mathbf{k}-\mathbf{g}>$ лишь для одного g, сингулярные вклады в наблюдаемые величины имеют вид

$$\delta N(E_F) = -\frac{1}{4\pi^2 E_0}\left(\frac{v}{2}\right)^{1/2} \ln|\alpha + v|, \tag{4}$$

$$\delta C^e_{ij} = -\frac{E_0}{\sqrt{2}\Omega}\frac{\partial(\alpha+v)}{\partial u_i}\frac{\partial(\alpha+v)}{\partial u_j}\delta N(E_F), \tag{5}$$

$$\delta\omega^2_{\mathbf{q}\nu} = \frac{\sqrt{2}}{M}|\mathbf{g}\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}|^2 E_0 v^{3/2}(\alpha+v)\ln|\alpha+v|, \tag{6}$$

где $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}$ – вектор поляризации, $E_0 = g^2/(8m^*)$ (m^* – эффективная масса), $v = |V(\mathbf{g})|/E_0$, $\alpha = (E_F - E_0)/E_0$, причем $\alpha + v \equiv -\eta/E_0 \to 0$. Можно показать, что характер сингулярностей по η сохраняется и в общем случае логарифмической ОВХ.

Из (5), (6) следует, что как и в случае [8], особенность в фононных частотах при не слишком малых q на одну степень η слабее, чем в акустической области, где $\delta\omega^2_{\mathbf{q}\nu} \sim \delta C_{ii}\mathbf{q}^2 \sim \mathbf{q}^2 \ln|\eta|$. Вид особенности меняется при

$$q_s \sim g|V(g)\eta|^{1/2}/E_0. \tag{7}$$

Соответствующая характерная температура для решеточных свойств равна $T_s = T_D q_s/g$ (T_D – температура Дебая).

В случае ФМ мы имеем сумму сингулярных вкладов с $\eta \to \eta_\pm = \eta \pm \Delta/2$, причем в типичных случаях (исключая близкую окрестность T_c) $|\eta| \ll \Delta$. Расчет электронных и фононных сингулярных вкладов в $\beta(T)$ и зависящую от температуры часть C_{ii} дает

$$\delta\beta_e(T) \sim T \sum_{\sigma=\pm} \frac{\partial \ln|\eta_\sigma|}{\partial P} \sim \frac{T}{\Delta}\frac{\partial\Delta}{\partial P}, \tag{8}$$

$$\delta C^e_{ii}(T) \sim -\frac{1}{\Omega}\left(\frac{T}{\Delta}\right)^2\left(\frac{\partial\Delta}{\partial u_i}\right)^2, \tag{9}$$

$$\delta\beta_{ph}(T) \sim \begin{cases} \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \frac{1}{\Delta}\frac{\partial\Delta}{\partial P}, & T \ll T_s \\ T^3 \sum\limits_\sigma \frac{\partial\eta_\sigma}{\partial P}\ln\left|\frac{\eta_\sigma}{E_F}\right| \sim T^3 \frac{\partial\eta}{\partial P}\ln\frac{\Delta}{E_F}, & T_s \ll T \ll T_D, \\ \sum\limits_\sigma \frac{\partial\eta_\sigma}{\partial P}\ln\left|\frac{\eta_\sigma}{E_F}\right| \sim \frac{\partial\eta}{\partial P}\ln\frac{\Delta}{E_F}, & T > T_D \end{cases} \tag{10}$$

$$\Omega\delta C^{ph}_{ii}(T) \sim \begin{cases} -\left(\frac{T}{T_D}\right)^4 \frac{1}{\Delta^2}\left(\frac{\partial\Delta}{\partial u_i}\right)^2, & T \ll T_s \\ T^4 \frac{\partial\eta}{\partial u_i}\frac{1}{\Delta}\frac{\partial\Delta}{\partial u_i}, & T_s \ll T \ll T_D. \\ T\frac{\partial\eta}{\partial u_i}\frac{1}{\Delta}\frac{\partial\Delta}{\partial u_i}, & T > T_D \end{cases} \tag{11}$$

В качестве примера рассмотрим магнитообъемные аномалии в слабом зонном ФМ $ZrZn_2$, где $\beta(T < T_c) < 0$ и имеет в T_c резкую аномалию [11]. Аналогичное поведение имеет место в MnSi [12]. Объяснение, данное в [1], кажется неубедительным, поскольку оно основано на предположении о минимуме $S_L(T)$ при $T = T_c$, которое не подтверждается более последовательным рассмотрением [13], дающим минимум при $T^* \sim T_c^2/E_F$. В то же время (10) сразу приводит к нужному поведению $\beta_{ph}(T)$, если учесть, что как следует из факта подавления ферромагнетизма с ростом P [14] и из анализа результатов зонного расчета [5], $\partial\Delta/\partial P < 0$ и $\partial\eta/\partial P > 0$. Отметим, что, в отличие от [1], выражение (10) допускает оба знака магнитного вклада в $\beta(T)$ в зависимости от знака $\partial\eta/\partial P$.

Рассмотрим теперь случай зонного антиферромагнетизма. В противоположность ФМ, здесь выраженная ОВХ вблизи E_F может отсутствовать (например, в Cr), но часто имеет место (например, в UPt_3). Она заведомо существует в тех АФМ, которые склонны к переходу в ФМ состояние (например, FeRh, инварные сплавы). Если не учитывать вклад процессов с переворотом спина в $\hat{D}(\mathrm{q})$ (спин-орбитальное взаимодействие мало), то при вычислении аномальных вкладов в F_{ph} следует рассматривать вектор АФМ структуры Q как вектор общего положения, в том смысле, что процессы переброса на Q не приводят к существенным аномалиям в $\Pi_{\mathrm{g},\mathrm{g}'}$ ни для каких g, g'. (В противном случае, для АФМ структуры с удвоением периода, роль g в $\hat{D}(\mathrm{q})$ играют векторы магнитной обратной решетки). Тогда имеем (см. [7,8])

$$\delta F_{ph} \sim -\delta\bar{\Pi} \equiv -\delta\sum_{\mathbf{q}} \Pi(\mathrm{q}), \tag{12}$$

где $\Pi(\mathbf{q})$ – статический поляризационный оператор в RPA. Примем для простоты модель "нестинга" $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ ($\epsilon_{\mathbf{k}}$ – электронный спектр, отсчитанный от E_F). Тогда в АФМ фазе со спектром $E_{\mathbf{k}} = \pm(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}$ (Δ – прямая АФМ щель) находим

$$\bar{\Pi} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{2\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{k}'}^2} \operatorname{th} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}, \qquad \bar{\Pi}(T \ll \Delta) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}'}} \left(1 + \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}}\right). \tag{13}$$

При $T \ll \Delta \ll W = Q^2/2m^*$ из (13) получаем

$$\frac{\partial \bar{\Pi}}{\partial \Delta} = 4N(0)\Delta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} \ln \left[\frac{\epsilon + (\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}}{\Delta}\right] \frac{\partial N(\epsilon)}{\partial \epsilon}. \tag{14}$$

Если затравочная плотность состояний $N(\epsilon)$ – регулярная функция вблизи $\epsilon = 0$, из (14) можно выделить особенность в $\bar{\Pi}$ и, следовательно, в F_{ph} порядка $\pm\Delta^2 \ln \Delta$, что дает вклады в решеточные свойства

$$\delta\beta_{ph} \sim \pm \frac{\partial \Delta^2}{\partial P} \ln \frac{\Delta}{W}, \qquad \delta C_{ii}(T) \sim \pm \frac{1}{\Delta^2} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial u_i}\right)^2. \tag{15}$$

По сравнению с обычным электронным вкладом возникает большой логарифмический множитель, связанный с особенностями зонной структуры в АФМ фазе (образование щели). При $\Delta \ll T$ (в узкой окрестности температуры Нееля) $\ln \Delta \to \ln T_N$. Результат (15) позволяет качественно понять магнитообъемные и магнитоупругие аномалии в Cr при $T \to T_N - 0$ (отрицательные значения $\beta(T)$ и резкое падение модуля сжатия [15]). Более слабые аномалии при $T \to T_N + 0$, по-видимому, связаны с ближним АФМ порядком.

Если $N(\epsilon)$ имеет при $\epsilon = 0$ обычную корневую ОВХ, то (14) дает $\delta F_{ph} \sim \pm\Delta^{3/2}$, а если логарифмическую ОВХ (как для квадратной решетки в центре зоны), то особенность резко усиливается: $\delta F_{ph} \sim \pm\Delta \ln \Delta$. Соответственно усиливаются и аномалии в β_{ph} и C_{ii}.

Итак, сильные аномалии решеточных свойств характерны для случаев, когда Δ резко меняется при изменении внешних параметров. Такая ситуация типична вблизи точек резкого изменения локальных моментов, в частности, для инварных сплавов, где к тому же имеет место антиферро-ферро переход. Интересны также выраженные магнитоупругие аномалии в парамагнитной фазе АФМ системы Cu–Mn [16].

В актинидных системах также наблюдаются яркие магнитоупругие и магнитообъемные аномалии [17,18]. В этом случае в нашем рассмотрении существенны релятивистские процессы с переворотом спина, и все сингулярности должны усиливаться: в (5) имеем $\ln \Delta \to 1/\Delta$, а в случае АФМ следует, вместо аномалий $\bar{\Pi}$ в (12), рассматривать, как и для ФМ, более сильные аномалии, связанные с процессами переброса.

---

1. Т.Мория, Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М.: Мир, 1988.
2. В.Л.Седов, Антиферромагнетизм гамма-железа. Проблема инвара. М.: Наука, 1987.
3. В.М.Зверев, В.П.Силин, ЖЭТФ **93**, 709 (1987).

4. D.J.Kim, Phys. Reports **171**, 129 (1988).
5. T.Jarlborg and A.J.Freeman., Phys. Rev. **B 22**, 2322 (1980); T.Jarlborg, A.J.Freeman, D.D.Koelling, J. Magn. Magn. Mater. **23**, 291 (1981).
6. В.Ю.Ирхин, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов, Письма в ЖЭТФ **53**, 351 (1991).
7. М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов, Письма в ЖЭТФ **42**, 393 (1985).
8. V.G.Vaks and A.V.Trefilov, J. Phys.: Cond Mat. **3**, 1389 (1991).
9. М.И.Кацнельсон, Г.В.Песчанский, А.В.Трефилов, ФТТ **32**, 470 (1990).
10. J.A.Hertz and M.A.Klenin, Phys. Rev. **B 10**, 1084 (1974); Physica **91B**, 49 (1977).
11. S.Ogawa and N.Kasai, J. Phys. Soc. Jpn. **27**, 789 (1969).
12. M.Matsunaga, Y.Ishikawa, T.Nakashima, J.Phys. Soc. Jpn. **51**, 1153 (1982).
13. V.Yu.Irkhin and M.I.Katsnelson, J. Phys.: Cond. Mat. **2**, 7151 (1990).
14. P.G.Mattocks and D.Merville, J. Phys. **F8**, 1291 (1978).
15. E.Fawcett and H.L.Alberts, J. Phys. Cond. Mat. **4**, 613 (1992).
16. Y.Tsunoda, N.Orishi, and N.Kunitomi, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 359 (1984).
17. A.de Visser et al., J. Magn. Magn, Mater. **108**, 61 (1992).
18. M.Yoshizawa et al., J. Magn. Magn, Mater. **52**, 413 (1985).