

## МАГНИТНО-НЕМАГНИТНЫЙ ПЕРЕХОД В СПЛАВАХ Ti – Mn

А.С.Щербаков, Н.В.Волкенштейн, Э.Г.Валиулин,  
Н.Я.Пермяков

Обнаружено, что с увеличением содержания магнитоактивного компонента (Mn) в титане средний магнитный момент на его ионах убывает и обращается в ноль при ~10 ат.% Mn. Найден закон концентрационного изменения магнитного момента.

Как было показано в<sup>1,2</sup>, среди всех примесей 3d-металлов в титане только ионы Mn и Cr являются носителями магнитного момента. Отмечалось, что температурозависящий вклад в магнитную восприимчивость, обусловленный магнитными моментами на ионах Mn и Cr, исчезает при содержании этих примесей более чем 10 ат.%, причем сплавы в этой области составов не проявляют каких-либо признаков магнитного упорядочения. Такое поведение является альтернативой обычной эволюции магнитного состояния сплавов, когда увеличение содержания магнитоактивного компонента приводит к возникновению в сплаве магнитного порядка. Поэтому изучение концентрационного поведения магнитного момента на ионах примесей в титане представляет значительный интерес. Здесь мы сообщаем о результатах такого исследования, проведенного на примере сплавов  $Ti_{1-x} - Mn_x$  ( $0 < x \leq 0,1$ ), и о наблюдении концентрационного магнитно-немагнитного перехода в смысле магнитного состояния ионов марганца.

Концентрационная зависимость эффективного магнитного момента, рассчитанного на один ион Mn, представлена на рис. 1. Величины магнитных моментов вычислялись из результатов

измерений температурных зависимостей магнитной восприимчивости, проведенных в магнитном поле  $H = 35$  кЭ в температурном диапазоне 4,2 – 300 К:

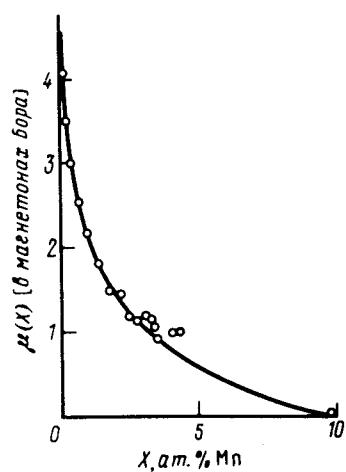


Рис.1. Концентрационная зависимость эффективного магнитного момента на ион Mn в сплавах Ti – Mn

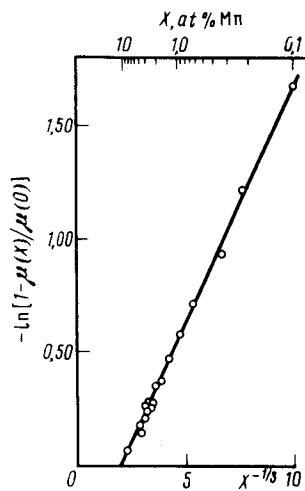


Рис.2

Как видно из рис.1, с увеличением содержания марганца в титане магнитный момент на ионах Mn резко убывает и обращается в ноль при  $x \approx 0,10 - 0,12$ . Таким образом, наблюдается магнитно-немагнитный переход с ростом концентрации магнитоактивного компонента. Мы обращаем внимание на следующие особенности кривой рис.1: а) при  $x \rightarrow 0$   $\mu(x) \rightarrow \rightarrow 5 \mu_B$  ( $\mu_B$  – магнетон Бора) и, таким образом, в „однопримесном пределе“ примеси Mn имеют целочисленную спиновую конфигурацию  $s = 2$ ; б) зависимость  $\mu(x)$  вогнута к осям координат; в) магнитный момент обращается в ноль при  $x \approx 0,10 - 0,12$ , что при числе ближайших соседей  $z = 8$  примерно соответствует условию  $zx \approx 1$ , когда в сферу ближайшего окружения примесного атома попадает еще один атом примеси.

Анализ возможных причин такого поведения магнитного момента приводит к заключению, что наиболее вероятной причиной исчезновения магнитного момента является возрастающее с ростом концентрации перекрытие волновых функций электронов, принадлежащих разным примесным атомам, что в конечном счете приводит к делокализации примесных 3d-состояний и образованию примесной  $d$ -зоны (на такую возможность впервые указал Фридель<sup>3</sup>).

В этом случае степень локализации электрона на примесном узле определяется конкуренцией между интегралом переноса типа „примесь – примесь“  $I(R)$  (где  $R$  – среднее расстояние между примесями) и кулоновской энергией корреляции на узле  $U$ . Тогда<sup>4</sup>:

$$\mu(R) \sim [1 - zI^2(R)/U^2], \quad (1)$$

Асимптотическая форма  $I(R)$  для волновых функций, спадающих с расстоянием как  $\exp(-2\alpha R)$  имеет вид

$$I(R) = I_0 \exp(-\alpha R). \quad (2)$$

Оценивая среднее расстояние между примесями как  $R \approx (3/4\pi)^{1/3}a / (zx)^{1/3}$  и подставляя эту величину в (2) и (2) в (1), получим для концентрационной зависимости магнитного момента:

$$\mu(x) = \mu(0) \left\{ 1 - \frac{zI_0^2}{U^2} \exp[-0,31 \alpha a / x^{1/3}] \right\}, \quad (3)$$

• где  $a$  – постоянная решетки.

Результаты обработки экспериментальных величин магнитного момента в соответствии с выражением (3) показаны на рис.2. В качестве  $\mu(0)$  мы приняли теоретическое значение  $4,9 \mu_B$  магнитного момента Mn для спиновой конфигурации  $S=2^{-5}$ , что хорошо согласуется с полученным нами значением  $\mu$  для „однопримесного предела“. Видно, что имеет место хорошее совпадение концентрационного поведения, предсказываемого выражением (3), с измеренными  $\mu$  значениями магнитных моментов в широком диапазоне (два порядка) изменения концентрации.

Насколько нам известно, зависимость магнитного момента типа (3) в литературе еще не обсуждалась; поэтому естественный интерес представляет сравнение этого выражения с результатами экспериментов на других подобных системах. Однако, одним из способов проверки физической обоснованности обработки экспериментальных данных с помощью (3) может служить оценка величины радиуса локализации  $\alpha^{-1}$   $d$ -функций Mn, которую можно сделать из наклона прямой рис.2. Мы получили  $\alpha^{-1} \approx 1,6 d$ , что является вполне разумной с физической точки зрения величиной.

Подчеркнем два наиболее существенных обстоятельства, вытекающие из представленных результатов. 1) В пределе сильно разбавленных сплавов примеси марганца в титане имеют ионную конфигурацию с целочисленным спином, откуда следует, что эффекты уширения примесных  $d$ -состояний за счет их перемещивания с состояниями зоны проводимости матрицы аномально малы (если они вообще имеют место). 2) То, что зависимость  $\mu(x)$  хорошо описывается выражением (3) означает, что степень уширения примесных состояний является функцией только (или почти только) среднего расстояния между атомами примесей, как это происходило бы при сближении атомов металла в вакууме (переход Мотта <sup>4</sup>).

Таким образом, представленные результаты указывают на то, что в исследуемых системах сплавов состояния зоны проводимости матрицы и примесные  $d$ -состояния выступают как автономные электронные подсистемы, что по-видимому, является определяющим фактором в эволюции электронного спектра сплавов с изменением состава.

#### Литература

1. Щербаков А.С., Прекул А.Ф., Волкенштейн Н.В., Николаев А.Л. ФТТ, 21, 1979, 21, 676
2. Щербаков А.С., Прекул А.Ф., Волкенштейн Н.В. ФТТ, 1980, 22, 2301.
3. Friedel J. Journ Phys. rad., 1958, 19, 537 (см. перевод в Сб. Теория ферромагнетизма металлов и сплавов, под ред. С.В.Вонсовского, М.: ИЛ, 1963, стр.368).
4. Мотт Н.Ф. Переходы металл — изолятор, М.: Наука, 1979.
5. Вонсовский С.В. Магнетизм, М.: Наука, 1971.