

НЕОДНОРОДНЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИЗМ ПРОВОДЯЩИХ МАГНЕТИКОВ С СИНГЛЕТНЫМ ОСНОВНЫМ СОСТОЯНИЕМ ИОНОВ

О.И.Зацаринный, Э.Л.Налаев

Низкотемпературное малоугловое рассеяние нейтронов в материалах типа HoN , которое обычно объясняют сложным типом их магнитного упорядочения, объяснено существованием в них областей повышенной намагниченности, стабилизированных электронами проводимости.

В некоторых соединениях редкоземельных элементов (HoN и т. д.) кристаллическое поле полностью снимает вырождение энергии магнитных ионов по направлениям их момента \mathbf{J} . Среднее значение $\langle J^z \rangle$ его проекции в основном состоянии иона было бы равным нулю, если бы не обменное взаимодействие иона с соседями, благодаря которому $\langle J^z \rangle$ становится отличным от нуля, хотя и не достигает $\pm J$. В результате такой магнетик обнаруживает тот или иной тип магнитного упорядочения с ненасыщенными атомными моментами.

Нейтронографическое исследование нитридов рядких земель (HoN и т. д.) показало, что при понижении температуры еще раньше рассеяния, соответствующего дальнему ферромагнитному порядку, появляется ярко выраженное рассеяние на малые углы, которое монотонно возрастает при понижении температуры [1].

Обычно такое рассеяние в ферромагнетиках связано с ближним ферромагнитным порядком и потому проходит через максимум в точке Кюри T_c . У нитридов максимум малоуглового рассеяния оказался при $T = 0$. Это заставило авторов [1] предположить, что он возникает вследствие суперпозиции рефлексов высшего порядка от чрезвычайно сложной магнитной структуры с отличной от нуля средней намагниченностью. Причина, по которой столь сложная магнитная структура может возникнуть в кристаллах с очень простой решеткой (типа NaCl) не ясна.

В настоящей статье предлагается более простая интерпретация результатов [1]. Судя по наличию щели в их оптическом спектре при металлическом характере проводимости, эти нитриды из-за нестехиометричности своего состава представляют собой сильно легированные полупроводники [2]. Электроны проводимости связаны s - f -обменным взаимодействием с локализованными f -моментами. Как и f - f -обмен с соседями, s - f -обмен тоже стремится увеличить значение локализованного момента. Если бы концентрация электронов была достаточно велика, во всем кристалле установилось бы насыщенное ферромагнитное упорядочение. При меньших концентрациях может оказаться энергетически выгодным неоднородное состояние кристалла, когда при $T = 0$ произойдет его разбиение на области с большей и меньшей намагниченностью. В первых из них образуется избыток концентрации электронов, который и будет поддерживать повышенное значение локальной намагниченности. Такое состояние является аналогом неоднородного ферро-антиферромагнитного состояния сильно легированных антиферромагнитных полупроводников. Из-за повышения кулоновской энергии при образовании областей с избытком заряда их радиус невелик ($\sim 10 - 100 \text{ \AA}$) [3].

Преимущество такой интерпретации перед данной в [1], кроме ясности физического механизма явления, состоит еще в следующем. Она в состоянии объяснить, почему заметное малоугловое рассеяние появляется выше точки Кюри T_c , и в самой точке Кюри не проходит через максимум. Действительно, области повышенной намагниченности, в которых сосредоточены электроны проводимости, при понижении температуры возникают еще до достижения T_c . В T_c их формирование уже заканчивается и поэтому интенсивность рассеяния нейтронов на них в T_c сравнима с максимальной (т. е. при $T = 0$). На фоне интенсивного малоуглового рассеяния, вызванного областями с повышенной намагниченностью, критическое малоугловое рассеяние может не проявиться.

Рассматривается простейшая модель магнетика с синглетным основным состоянием ионов: уровень иона $|1\rangle$, наиболее близкий к основному $|0\rangle$, тоже синглетный, так что $\langle 0|J^z|0\rangle = \langle 1|J^z|1\rangle = 0$, но матричный элемент J^z для экситонного перехода $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $\langle 0|J^z|1\rangle = c$, отличен от нуля. С учетом f - f -обмена и s - f -обмена гамильтониан системы запишется в виде

$$H = \omega \sum b_g^* b_g - \frac{K}{2} \sum \langle 0|J_g|1\rangle \langle 1|J_g|0\rangle (b_g^* + b_g)(b_g^* + \Delta + b_{g+\Delta}),$$

$$- A \sum \langle 0|J_g|1\rangle (s)_{\sigma\sigma'} a_{g\sigma}^* a_{g\sigma'} + B \sum a_{g\sigma}^* a_{g+\Delta\sigma}, \quad (1)$$

где b_g^* , b_g ($a_{g\sigma}^*$, $a_{g\sigma}$ — соответственно) — операторы рождения и уничтожения магнитного экситона на атоме g и электрона проводимости, $(s)_{\sigma\sigma'}$ — матрицы Паули, Δ — символ ближайшего соседа (их число равно z).

В том, что однородное ненасыщенное ферромагнитное состояние вырожденных полупроводников может быть неустойчивым, проще всего убедиться расчетом их статической диэлектрической проницаемости

$\epsilon(q)$. Допустим, что магнитное упорядочение целиком осуществляется за счет косвенного обмена через s -электроны, которые предполагаются полностью поляризованными по спину. Из гамильтониана (1) с $K=0$ в приближении самосогласованного поля следует, что s -электрон получает за счет s - f -обмена выигрыш в энергии

$$V = - M(\nu) \frac{|A|}{2}; \quad M(\nu) = \frac{\gamma \nu c}{\sqrt{\gamma^2 \nu^2 + \omega^2/4}}; \quad \gamma = \frac{|A| c}{2}, \quad (2)$$

где $M(\nu)$ — значение момента, индуцированного электронами проводимости. Электрическое поле, изменяя локальное значение числа электронов на атом ν , изменяет, тем самым, и $M(\nu)$ (магнитоэлектрический эффект). Расчет, аналогичным проведенному в [3] для ферромагнетика при $T=0$, нетрудно убедиться, что диэлектрическая проницаемость однородного ненасыщенного ферромагнетика при $q > 0$ дается выражением

$$\frac{\epsilon(q)}{\epsilon} = 1 + \frac{\lambda^2}{q^2(1-\Gamma_0)}; \quad \lambda^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\mu \epsilon_0};$$

$$\Gamma_0 = \frac{3}{8\mu\nu} \frac{(\gamma\nu\omega)^2}{[\gamma^2\nu^2 + \omega^2/4]^{3/2}}; \quad \mu = \frac{(b\omega^2 n)^{2/3}}{2m}, \quad (3)$$

где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость чистого полупроводника, μ — фермиевская энергия электронов, $n = \nu/a_3$ — их концентрация.

Величина Γ_0 (3) как функция ν проходит через максимум при $\nu = \omega/4\sqrt{2}\gamma$. При $n \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\omega = 10^{-3} \text{ эв}$, эффективной массе m порядка истинной, $AJ \sim 0,5 \text{ эв}$, $c \sim \sqrt{J}/2$ максимальное значение функции обратной связи Γ_0 может превышать единицу. В принятом приближении этого достаточно (но не необходимо) для неустойчивости однородного состояния. Если кристалл разобьется на области с $\nu < \nu_m$ и $\nu > \nu_m$, в которых $\Gamma_0 < 1$ необходимые условия для стабильности такого неоднородного ферромагнитного состояния, во всяком случае, будут выполнены.

Чтобы получить представление о свойствах неоднородного состояния, будет рассмотрен простейший случай, когда концентрация электронов невелика, и каждый из них создает область повышенной намагниченности независимо от остальных. Соответственно, доминирующим считается прямой f - f -обмен ($K > AJ\nu$). В приближении молекулярного поля свободная энергия такого магнетика в расчете на атом дается выражением:

$$F_M = \frac{\omega}{2} - T \ln \left\{ 2 \operatorname{ch} \left[\frac{\omega}{2T} \sqrt{1 + \left(\frac{aM^2}{c} \right)^2} \right] \right\} + \frac{KzM^2}{2}; \quad a = \frac{2Kzc^2}{\omega}, \quad (4)$$

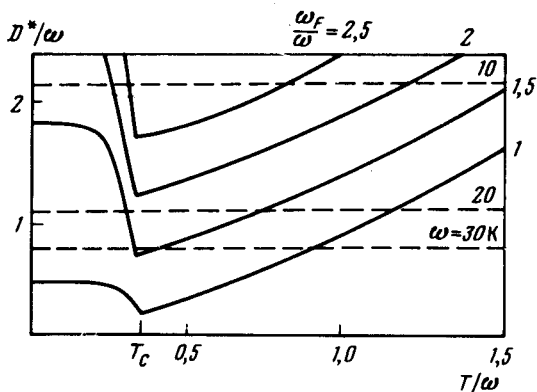
где величина индуцированного момента определяется из условия самосогласования

$$\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha M}{c}\right)^2} = \alpha \operatorname{th} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha M}{c}\right)^2} \frac{\omega}{2T} \right). \quad (5)$$

Если в какой-то микрообласти радиусом R перевести локализованные f -спины в состояния, в которых их средние проекции J^z будут равны предельному значению J , такая область будет представлять потенциальную яму для электрона проводимости глубиной $A/2(J - M)$. С другой стороны, на создание насыщенного ферромагнитного упорядочения затрачивается свободная энергия (на атом) $D_F = \omega_F - F_M$, где $\omega = \delta - K_z J/2$, δ — разность средней энергии иона в состоянии с $J^z = J$ и энергией его основного состояния $|0\rangle$. Проводя расчет тем же вариационным методом, что и для ферронных состояний в антиферромагнетике [3], с радиусом R в качестве вариационного параметра, получаем условие термодинамической выгодности такого состояния в ненасыщенном ферромагнетике, когда электрон локализуется в созданной им самим области повышенной намагниченности

$$D^* = \left[1 - \frac{M(T)}{J} \right]^{-5/2} D_F < 0,2 W \left(\frac{AJ}{2W} \right)^{5/2} = D_c, \quad (6)$$

где $W = \epsilon / \mu a^3$ — ширина зоны проводимости электрона.



На рисунке представлены результаты численного расчета величины D^* , проведенного при помощи формул (1) — (3) при некоторых значениях ω_F/ω с использованием следующих численных значений параметров: $AJ/2W = 0,1$, $c/J = 0,6$, $\alpha = 1,2$ (этому значению α соответствует момент при $T = 0$, равный $0,55c$). При заданном значении ω автолокализованное состояние электрона в области с повышенной намагниченностью стабильно, когда соответствующая кривая лежит ниже прямой D^*/ω . Как видно из рисунка при $\omega_F/\omega = 1,5$ и $\omega = 10K$ состояние с повышенной намагниченностью стабильно от $T = 0$ до $T_d = 17K$, т. е. T_d значительно выше $T_c = 3,3K$ (T_c найдена по формуле (5) из условия $M(T_c) = 0$).

Поступила в редакцию
6 апреля 1977 г.

Литература

- [1] H. Child, M. Wilkinson, J. Cable, W. Koehler, E. Wollan. Phys. Rev., 131, 922, 1963.
- [2] N. Selar. J. Appl. Phys., '35, 1534, 1964.
- [3] Э.Л.Нагаев. УФН, 117, 437, 1975.
-