Письма в ЖЭТФ, том 18, вып. 5, стр. 326 – 329 5 сентября 1973 г.

К ТЕОРИИ ИНВАРНЫХ СПЛАВОВ

Е.И.Кондорский, А.В.Ведяев

В работе [1] одним из авторов настоящей статьи и Седовым было показано, что аномалии инварных сплавов можно объяснить исходя из предположения, что в гранецентрированной решетке этих сплавов между электронами соседних ионов железа имеется обменное взаимодействие, частично разрушающее параллельную ориентацию спинов, т.е. интеграл обмена для соседних ионов железа $I^{FeFe} < 0$, в то время как соответствующие интегралы I^{FeNi}, $I^{NiNi} > 0$. Модель, предложенная в [1], получила дальнейшее развитие в работах [2, 3]. В последние годы особенности инварных сплавов обсуждались также с точки зрения модели жестких зон в работах [4, 5].

Основной недостаток работ [1 – 3] заключался в том, что использованная в них модель локализованных спинов скорее подходила к диэлектрикам, чем к металлическим сплавам. Наоборот, недостаток работ [4, 5] состоял в том, что они основывались на модели, в которой не учитывались особенности кривой плотности состояний для неупорядоченного сплава. Не учитывалось также обменное взаимодействие между ближайшими соседями, которое оказывает существенное влияние на магнитные свойства сплавов [6, 7].

В настоящей статье магнитные свойства инварных сплавов обсуждаются с точки зрения модели сильно связанных электронов и применяется метод когерентного потенциала (CPA), предложенный в работах Совена [8] и Велицкого, Кирпатрика и Эренрейха [9], (см. также [10]). При этом в гамильтониан дополнительно вводятся параметры, характеризующие усредненное по конфигурациям обменное взаимодействие электронов между соседними ионами.

Запишем гамильтониан для бинарного ферромагнитного сплава в следующем виде

$$H = H_1 + H_2, \tag{1}$$

$$H_1 = \sum_{n,m\sigma} t_{nm} a^+_{n\sigma} a_{m\sigma} + \sum_{n,\sigma} \epsilon_n n_{n\sigma} + (1/2) \sum_{n,\sigma} U_n n_{n\sigma} n_{n,-\sigma}, \tag{2}$$

$$H_2 = -2 \sum_{n,m} I_{nm} (S^x_n S^x_m + S^y_n S^y_m + S^z_n S^z_m), \tag{3}$$

$$\begin{aligned} S^x_n &= (1/2)(a^+_{n\uparrow} a_{n\downarrow} + a^+_{n\downarrow} a_{n\uparrow}), \\ S^y_n &= (1/2i)(a^+_{n\uparrow} a_{n\downarrow} - a^+_{n\downarrow} a_{n\uparrow}), \\ S^z_n &= (1/2)(n_{n\uparrow} - n_{n\downarrow}), \end{aligned} \tag{4}$$

где $t_{nm} = t^{AA}_{nm}, t^{AB}_{nm}, t^{BB}_{nm}$ – интегралы перескока и $I_{nm} = I^{AA}, I^{AB}, I^{BB}$ – обменные интегралы между электронами ближайших соседних ионов A и B, занимающих узлы n и m решетки, $\epsilon_n = \epsilon^A, \epsilon^B$, $U_n = U^A, U^B$ – интегралы, характеризующие кулоновское взаимодействие электронов на ионах сорта A и B, занимающих узел n, $a^+_{n\sigma}$ и $a_{n\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ на узле n. С каждым узлом будем связывать два состояния: одно со спином вверх, другое со спином вниз. В рассматриваемом случае инварных сплавов мы принимаем, как это было сделано в работе [1], $I^{AA} < 0$, $I^{AB} > 0$, $I^{BB} > 0$ и $U^A = U^B = U$.

Будем искать решение для средней энергии и средних магнитных моментов в приближении Хартри – Фока, заменяя в третьей сумме гамильтониана H_1 оператор $n_{n,-\sigma}$ его средним значением $\langle n_{n,-\sigma} \rangle$ и представляя H_2 в следующем виде

$$H_2 = -\sum_{n,m,\sigma} I_{nm} a^+_{n\sigma} a_{n,-\sigma} a^+_{m,-\sigma} a_{m\sigma} - (z/2) \sum_n I_n (n_{n\uparrow} - n_{n\downarrow}), \tag{5}$$

где

$$\begin{aligned} I_n &= I^A, I^B, \\ I^A &= x I^{AA} M_A + y I^{AB} M_B, \\ I^B &= x I^{AB} M_A + y I^{BB} M_B \end{aligned} \tag{6}$$

z – число ближайших соседей (в рассматриваемом случае $z = 12$) x, y – концентрации ионов сорта A и B соответственно, M_A и M_B – средние атомные магнитные моменты, выраженные в магнетонах Бора $M_{A(B)} = \langle n_{n\uparrow}^{A(B)} \rangle - \langle n_{n\downarrow}^{A(B)} \rangle$.

В рассматриваемом случае мы не будем принимать во внимание разностей типа $t_{nm}^{AA} - t_{nm}^{BB}$ и положим

$$t_{nm}^{AA} = t_{nm}^{AB} = t_{nm}^{BB} = t_{nm}^{(0)}. \tag{7}$$

Подставляя (5) в (1), пренебрегая в (5) первой суммой, которая при низких температурах мала по сравнению со второй, учитывая (7) и вводя среднее значение $\langle n_{n,-\sigma} \rangle$ в H_1, запишем гамильтониан H в следующем виде:

$$H = \sum_{\sigma} H_{\sigma} = \sum_{n,m,\sigma} t_{nm}^{(0)} a_{n\sigma}^{+} a_{m\sigma} + (1/2) \sum_{n\sigma} \epsilon_{n\sigma} n_{n\sigma}, \tag{8}$$

где

$$\begin{aligned} \epsilon_{n\uparrow} &= \epsilon_{\uparrow}^{A(B)} = \epsilon^{A(B)} + (1/2)\,[U \langle n_{n,-\sigma}^{A(B)} \rangle - z I^{A(B)}], \\ \epsilon_{n\downarrow} &= \epsilon_{\downarrow}^{A(B)} = \epsilon^{A(B)} + (1/2)\,[U \langle n_{n\sigma}^{A(B)} \rangle + z I^{A(B)}]. \end{aligned} \tag{9}$$

При гамильтониане такого вида можно пользоваться методикой СРА. Нами были проведены расчеты средних атомных моментов компонент неупорядоченного сплава при различных предположениях относительно формы кривой плотности состояний. Ниже приводятся результаты расчетов для двух предельных случаев: 1) случая расщепленных узких полос, когда $\delta_{\sigma} >> 1$ и 2) случая псевдокристалла, когда, наоборот, $\delta_{\sigma} << 1$, где $\delta_{\sigma} = \epsilon_{\sigma}^{A} - \epsilon_{\sigma}^{B} / W$ и W – ширина полосы. Случай изолятора, когда $W = 0$, при этом исключается, т.е. при $\delta_{\sigma} >> 1$ и $W \to 0$ рассматривается предельный случай, когда метод самосогласованного поля еще применим.

В первом случае при $W \to 0$ расчет приводит к следующим выражениям для атомных магнитных моментов

$$M_A = n_0^A, \quad M_B = n_0^B \qquad \text{при} \quad x \leqslant x_0, \tag{10а}$$

$$M_A = \frac{(1 - x)\, I^{AB}}{x\,|I^{AA}| - (U/2z)}\, n_0^B \qquad \text{при} \quad x \geqslant x_0, \tag{10б}$$

$$x_0 = 1 + \frac{1}{2z} \frac{U}{I^{AB}} \frac{n_0^A}{n_0^B} \Bigg/ 1 + \frac{|I^{AA}|}{I^{AB}} \frac{n_0^A}{n_0^B} \tag{11}$$

n_0^A и n_0^B – число электронов на один атом в чистом металле A и B соответственно. Формулы (10) качественно правильно описывают наблюдаемую зависимость от концентрации величин средних магнитных моментов $M = xM_{Fe} + yM_{Ni}$ сплавов. Задавая I и U/z можно грубо оценить концентрацию x_0. Так, при $|I^{AA}| \approx I^{AB} \approx I^{BB} \approx U/z$, подставляя $n_0^A = n_0^{Fe} = 2{,}6$ и $n_0^B = n_0^{Ni} \doteq 0{,}6$, получим из (11) $x_0 \approx 0{,}6$, что согласуется с наблюдаемой величиной.

В случае псевдокристалла для полос прямоугольной формы расчет приводит к выражению

$$M = xM_A + yM_B = (\nu/2WN)\{xM_A[(U/2z) + xI^{AA} + yI^{AB}] +$$

$$+ yM_B[(U/2z) + xI^{AB} + yI^{BB}]\}, \qquad (12)$$

где ν число состояний в полосе, N – число атомов сплава.

Так как в рассматриваемом случае $\delta_\sigma << 1$, что равносильно условию $W >> U, I$, равенства (12) совместимы лишь при $M = M_A = M_B = 0$. Предельный случай узких полос, хотя является грубым приближением, однако позволяет обнаружить возможную причину наблюдаемых особенностей инварных сплавов.

Московский
государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
6 июня 1973 г.
После переработки
25 июля 1973 г.

Литература

[1] E.I.Kondorsky, V.L.Sedov. J. Appl. Phys. Suppl., 31, 331S, 1960.
[2] С.К.Сидоров, А.В.Дорошенко. ФММ, 19, 786, 1965; В.Е.Архипов, А.З.Меньшиков, С.К.Сидоров. ЖЭТФ, 61, 1501, 1971.
[3] T.Odagaki, T.Yamamoto. J. Phys. Soc. Japan, 32, 104, 1972.
[4] T.Mizocouchi. J. Phys. Soc. Japan, 25, 904, 1968.
[5] M.Shimizu, S.Hirooka. Phys. Lett., 27A, 530, 1968; 30A, 133, 1969.
[6] M.Collins, G.G.Low. Proc. Phys. Soc. London, 86, 535, 973, 1965.
[7] И.М.Пузей, В.И.Гоманьков, Л.А.Лошманов. ФММ, 25, 36, 1968. Изв, АН СССР, сер. физ., 28, 440, 1964.
[8] P.Soven. Phys. Rev., 156, 809, 1967.
[9] B.Velicky, S.Kirpatrick, H.Ehrenreich. Phys. Rev., 175, 747, 1968.
[10] F.Brouers, A.V.Vedyayev, M.Giorgino. Phys. Rev., B7, 380, 1973.