Письма в ЖЭТФ, том 61, вып.1, стр.43 - 47

О ПСЕВДОДИПОЛЬНЫХ СИЛАХ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ РЕДКИХ ЗЕМЕЛЬ И АКТИНИДОВ

С.В.Малеев

Петербургский институт ядерной физики РАН
188350 Гатчина, Санкт-Петербург

Поступила в редакцию 24 ноября 1994 г.

Показано, что асимметричное рассеяние электронов, ответственное за аномальный эффект Холла, приводит также к псевдодипольному взаимодействию локализованных моментов. В случае низкотемпературных фазовых переходов на примере простой кубической решетки показано, что псевдодипольное взаимодействие может приводить к анизотропии в спиновом и координатном пространствах и несохранению величины спина в магнитной элементарной ячейке.

В настоящей работе обсуждается вопрос о природе псевдодипольного взаимодействия (ПДВ) ионов редких земель и актинидов в металлах и сплавах. Впервые феноменологически это взаимодействие было введено Ван-Флеком [1] (Van Fleck) для объяснения магнитной анизотропии ионов со спином $S = 1/2$. Оно имеет ту же структуру, что и обычное дипольное взаимодействие, однако убывает с расстоянием быстрее, чем R^{-3}. В случае, когда состояние иона характеризуется полным моментом J, псевдодипольные взаимодействия двух ионов можно записать в виде

$$V_{pd}(\mathbf{R}) = \frac{1}{3}G(\mathbf{R})[\mathbf{J}_1\mathbf{J}_2 - 3(\mathbf{J}_1\hat{R})(\mathbf{J}_2\hat{R})], \qquad (1)$$

где $\hat{R} = \mathbf{R}$.

Мы показываем, что псевдодипольное взаимодействие порождается так называемым асимметричным рассеянием (scew scattering) электронов проводимости на локализованных моментах таким же образом, как взаимодействие РККИ (RKKY) — обычным обменным рассеянием. Насколько нам известно, это первый вывод ПДВ на основании микроскопической модели.

Псевдодипольное взаимодействие привлекалось для объяснения магнитной анизотропии переходных металлов [2]. В работах [3–5] обсуждался вопрос о возможном влиянии ПДВ на критическую динамику ферромагнетиков. Однако, согласно [6], оно, по-видимому, в этом случае несущественно.

Как мы покажем ниже, в случае низкотемпературных фазовых переходов псевдодипольное взаимодействие ближайших соседей $G(R_{nn}) = G_{nn}$ может оказаться сравнимым с обычным обменным взаимодействием. В результате, поскольку ПДВ связывает спиновое и координатное пространства, возникает ряд качественно новых явлений. Мы коротко рассматриваем их на примере антиферромагнетиков, имеющих простую кубическую решетку. Мы показываем, что ПДВ может приводить к анизотропии в спиновом и координатном пространствах и несохранению величины узельного спина в пределах магнитной элементарной ячейки.

По-видимому, впервые асимметричное рассеяние (АР) было введено в работе Кондо [7], где было показано, что существует обменное взаимодействие между локализованными спинами и орбитальным моментом $\vec{\ell}$-электронов проводимости, которое в нашем случае пропорционально $J\vec{\ell}$. Соответствующий вклад в амплитуду рассеяния пропорционален $i[\mathbf{k}' \times \mathbf{k}]\mathbf{J}$, где $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ — импульсы электрона до и после рассеяния. Он описывает асимметричное рассеяние, поскольку меняет знак при перестановке $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$. Это асимметричное рассеяние приводит к аномальному вкладу в проводимость Холла, который пропорционален χH, где χ — восприимчивость подсистемы локализованных моментов.

Следует отметить, что в дальнейшем изучение аномального эффекта Холла потребовало учета деталей асимметричного рассеяния, существенных вблизи от поверхности Ферми, таких, как эффект Кондо и резонансное рассеяние в системах с промежуточной валентностью [8,9]. Ниже нас будет интересовать взаимодействие локализованных моментов и температуры, большие по сравнение с температурой Кондо. Поэтому особенности поведения асимметричного рассеяния вблизи от поверхности Ферми для нас не существенны, и в дальнейшем мы основываемся на результатах ранних работ [7] и [10].

Следуя [7,10], запишем взаимодействие электронов проводимости с локализованными моментами в виде

$$V = -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} a^{+}_{\mathbf{k}\mu} a_{\mathbf{k}\nu} \left\{\frac{1}{2}(g_J-1)\Gamma_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\vec{\sigma}_{\mu\nu} + \left(\frac{i}{2}\right)(2-g_J)\delta_{\mu\nu}F_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}[\mathbf{k}'\times\mathbf{k}]\right\}\mathbf{J}, \qquad (2)$$

где $\vec{\sigma}$ — вектор Паули и $F_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}/k^2 = F_2$ — энергия асимметричного взаимодействия. При малом радиусе f–орбиты r_f второе слагаемое в (2) возникает в результате разложения обменного взаимодействия до второго порядка по параметру kr_f [7] и по порядку величины в $(kr_f)^2$ раз меньше первого. В этом приближении $F_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ не зависит от $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$.

Первое слагаемое в (2) приводит к известному взаимодействию РККИ, которое имеет вид

$$\Delta E^{RKKY}(\mathbf{R}) = \frac{3\pi\Gamma^2(g_J-1)^2\rho(E_F)}{2(2k_F R)^3}\left(\cos 2k_F R - \frac{\sin 2k_F R}{2k_F R}\right)(\mathbf{J}_1\mathbf{J}_2), \qquad (3)$$

где $\rho(E_F) = 3/2E_F$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми.

Взаимодействие двух ионов, обусловленное вторым слагаемым в (2), можно записать так

$$\begin{aligned}\Delta E^{(AS)}(\mathbf{R}) \;&=\; -\frac{(2-g_J)^2}{N^2}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} F_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}[\mathbf{k}_1\times\mathbf{k}_2]_\alpha \times \qquad (4)\\ &\times\; [\mathbf{k}_2\times\mathbf{k}_1]_\beta f_{\mathbf{k}_2}(1-f_{\mathbf{k}_1})\frac{\cos(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\mathbf{R}}{\epsilon_{\mathbf{k}_2}-\epsilon_{\mathbf{k}_2}}J_1^\alpha J_2^\beta,\end{aligned}$$

где $\epsilon_{\mathbf{k}}$ — энергия электрона, $f_{\mathbf{k}}$ — функция Ферми, и нужно брать главное значение суммы. Это выражение удобно переписать в виде

$$\begin{aligned}\Delta E^{(AS)}(\mathbf{R}) \;&=\; J_{1\alpha}J_{2\beta}\,\epsilon_{\alpha\mu\nu}\epsilon_{\beta\rho\varphi}\,\Lambda_{\mu\nu\rho\varphi}(\mathbf{R}), \qquad (5)\\ \Lambda_{\mu\nu\rho\varphi}(\mathbf{R}) \;&=\; \frac{(2-g_J)^2}{N^2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|F_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 f_{\mathbf{k}_2}(1-f_{\mathbf{k}_1})\frac{\cos(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\mathbf{R}}{\epsilon_{\mathbf{k}_2}-\epsilon_{\mathbf{k}_1}}k_{1\mu}k_{1\rho}k_{2\nu}k_{2\varphi}.\end{aligned}$$

Здесь слагаемое, пропорциональное $f_{\mathbf{k}_1}f_{\mathbf{k}_2}$, равно нулю, так как меняет знак при замене $\mathbf{k}_1$ на $\mathbf{k}_2$.

Определим теперь структуру тензора Λ. Внутренняя сумма по $\mathbf{k}_1$ является тензором второго ранга, и для кубических кристаллов имеет вид

$$g_1(\mathbf{R}, \in_{\mathbf{k}_2})\delta_{\mu\rho} + g_2(\mathbf{R}, \in_{\mathbf{k}_2})\hat{R}_\mu \hat{R}_\rho. \tag{6}$$

Подставляя эту формулу в сумму по $\mathbf{k}_2$, получаем следующее выражение для тензора Λ:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mu\nu\rho\varphi} &= A(\mathbf{R})\delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\varphi} + B(\mathbf{R})\hat{R}_\mu \hat{R}_\rho \delta_{\nu\varphi} + \\ &+ C(\mathbf{R})\delta_{\mu\rho}\hat{R}_\nu \hat{R}_\varphi + D(\mathbf{R})\hat{R}_\mu \hat{R}_\rho \hat{R}_\nu \hat{R}_\varphi. \end{aligned} \tag{7}$$

Если теперь (7) подставим в (4), то получим

$$\begin{aligned} \Delta E^{(AS)} &= 2\left[A + \frac{1}{3}(B+C)\right] \mathbf{J}_1\mathbf{J}_2 + \\ &+ \frac{1}{3}(B+C)[(J_1J_2) - 3(\mathbf{J}_1\hat{R})(\mathbf{J}_2\hat{R})]. \end{aligned} \tag{8}$$

Здесь первое слагаемое имеет обычную обменную структуру, а второе является псевдодипольным (1). Следует отметить, что структура выражения (8) является прямым следствием того, что аномальное рассеяние пропорционально векторному произведению $\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2$ и кубической симметрии кристалла. Для кристаллов низшей симметрии выражение для $\Delta E^{(AS)}$, очевидно, имеет более сложный вид. В случае сферической поверхности Ферми и квадратичного закона дисперсии несложные, но громоздкие вычисления дают

$$\begin{aligned} A &= 6\pi\rho(E_F)(2-g_J)^2 F_2^2 (2k_F R)^{-5}\Big[-\cos 2k_F R + \\ &+ \frac{7\sin 2k_F R}{2k_F R} + \frac{18\cos 2k_F R}{(2k_F R)^2} - \frac{18\sin 2k_F R}{(2k_F R)^3}\Big]; \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} B &= C = \frac{3\pi}{2}\rho(E_F)(2-g_J)^2 F_2^2 (2k_F R)^{-4}\Big[\sin 2k_F R + \\ &+ \frac{10\cos 2k_F R}{2k_F R} - \frac{46\sin 2k_F R}{(2k_F R)^2} - \frac{108\cos 2k_F R}{(2k_F R)^3} + \\ &+ \frac{108\sin 2k_F R}{(2k_F R)^4}\Big]. \end{aligned} \tag{10}$$

Мы видим, что, как и следовало ожидать, $\Delta E^{(AS)}$ осциллирует с тем же периодом $R_0 = \pi/k_F$, что и взаимодействие РККИ. При этом обе его части — обменная и псевдодипольная — при больших R пропорциональны R^{-4}, то есть убывают быстрее как взаимодействия РККИ, так и дипольного. На малых расстояниях ($2k_F R \ll 1$), согласно (9) и (10), обменная часть $\Delta E^{(AS)}$ отрицательна, так же как и взаимодействие РККИ, а функция $G(\mathbf{R}) = B(\mathbf{R}) + C(\mathbf{R})$ положительна.

Однако на расстояниях порядка межатомных формулы (9) и (10), очевидно, неприменимы, и для взаимодействия ближайших соседей мы имеем оценку

$$B(R_{nn}) \sim C(R_{nn}) \sim F_2^2/E_F = G_{nn}.$$

В работах [7,10] величина F_2 определялась из данных по аномальному эффекту Холла. Было показано [7], что $F_2 = 5$ мэВ и 20 мэВ для эрбия и диспрозия, соответственно. Для сплавов редкоземельных элементов с Au, Ag, Al величина F_2 определялась в [10]. Были найдены течения F_2, лежащие в интервале $1,6 - 6,5$ мэВ. Таким образом, считая $E_F = 10$ эВ, находим, что G_{nn} лежит в интервале от $2,2 \cdot 10^{-3}$ К до $0,35$ К, то есть может меняться от величины, малой по сравнению с обычным дипольным взаимодействием ближайших соседей $V_d \sim 10^{-2}$ К, до значения, сравнимого с величиной обменного взаимодействия, характерного для низкотемпературных фазовых переходов в редкоземельных металлах и актинидах, когда $T_N(T_c)$ порядка нескольких градусов.

Обсудим теперь некоторые физические следствия, к которым приводит псевдодипольное взаимодействие. Оно, так же как и дипольные силы, нарушает закон сохранения полного спина системы и поэтому дает вклад в релаксацию однородной намагниченности. Поэтому, если ПДВ больше дипольных сил и анизотропии, им определяется частотная зависимость однородной восприимчивости $\chi(\omega)$. Исключение составляют ферромагнетики в дипольной области температур, где $4\pi\chi > 1$ [6]. В этом случае из-за дальнодействия дипольные силы приводят к эффектам размагничивания, и ими пренебрегать нельзя.

В случае низкотемпературных фазовых переходов ПДВ может существенно влиять на структуру основного состояния. Мы проиллюстрируем это на простейшем примере антиферромагнетика с простой кубической решеткой и взаимодействием ближайших соседей. Для псевдодипольных сил последнее оправдано из-за быстрого их убывания. Рассмотрение более реалистических случаев выходит за рамки этого краткого сообщения. Для ближайших соседей Фурье-образ тензора $R_\alpha R_\beta$ равен $2\delta_{\alpha\beta}\cos k_\alpha$, где $\alpha = x, y, z$. В результате, для спиновой функции Грина в приближении хаотических фаз (молекулярного поля) стандартным методом получаем

$$G_\alpha(R) = G_0 \left\{ 1 + \frac{2G_0}{T}[J(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) - G_{nn}\cos k_\alpha] \right\}^{-1}, \qquad (11)$$

где $G_0 = J(J+1)/3$. Из этого выражения при $J > G_{nn}$ следует обычная антиферромагнитная структура $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$. Однако при этом появляется анизотропия в спиновом пространстве, и спины упорядочиваются вдоль одной из кубических осей. Если же $G_{nn} > J$, возникает нестандартная ферромагнитная структура типа $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ со спинами вдоль оси x, причем их зависимость от $\mathbf{R}$ описывается выражением

$$S_x(\mathbf{R}) = \frac{1}{3}S_0(1 + \cos\pi R_y + \cos\pi R_z). \qquad (12)$$

В результате величина спина на узле не является постоянной величиной: $S_x(0,0,0) = S_0$, $S_x(0,1,0) = S_x(0,01) = S_0/3$ и $S_x(0,1,1) = -S_0/3$. Такое несохранение величины спина на узле является следствием того, что ПДВ не коммутирует с обменным гамильтонианом.

В заключение отметим, что псевдодипольное взаимодействие должно появляться в случае любой асимметрии рассеяния в $\mathbf{k}$-пространстве, приводящей к аномальному эффекту Холла. Поэтому ПДВ должно иметь место и при других видах асимметричного рассеяния кроме рассмотренной выше $\mathbf{J}\vec{\ell}$-связи. В частности, оно будет иметь место и в случае вариантов асимметричного рассеяния рассмотренного в [8,9]. Однако при этом для его значительной величины необходимо, чтобы асимметричное рассеяние существовало не только вблизи от поверхности Ферми, но и в энергетическом слое порядка E_F. Действительно, выражения типа (9) и (10) получаются благодаря интегрированию по всей сфере Ферми.

Автор благодарит И.Ю.Данилова за интересные обсуждения проблемы псевдодипольных сил. Настоящая работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 94-02-05649-а) и Международного научного фонда (грант R3Y 000).

---

1. J.H.Van-Vleck, Phys. Rev **52**, 1178 (1937).
2. R.J.Joenk, Phys. Rev. **130**, 932 (1963).
3. H.C.Hohenemer, L.Chow, and R.M.Suter, Phys.Rev. **B26**, 5056 (1982).
4. F.Mezei, Phys. Rev. Lett. **49**, 1096 (1982).
5. D.L.Huber, Solid. State Comm. **48**, 83 (1983).
6. S.V.Maleyev, In Soviet Sci. Reviews, Ser. A, Phys. Rev. Ed. by I.M.Khalatnikov, **8**, 323 (1987).
7. J.Kondo, Progr. of Theor.Phys. **27**, 772 (1962).
8. P.Coleman, P.W.Anderson, and T.V.Ramankrishnan, Phys. Rev. Lett. **55**, 414 (1985).
9. A.Fert and P.M.Levy, Phys. Rev. **B36**, 1907 (1987).
10. A.Fert and A.Friedech, Phys.Rev. **B13**, 397 (1976).