

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-14U

Л.А. Дорош, Г.В. Понеділок, Ю.К. Рудавський

НАМАГНІЧЕНІСТЬ І КРИТИЧНА ТЕМПЕРАТУРА
БІНАРНОГО АМОРФНОГО СПЛАВУ

УДК: 538.955, 539.213.2

PACS: 75.50.Kj, 71.45.Gm

Намагніченість і критична температура бінарного аморфного сплаву

Л.А. Дорош, Г.В. Понеділок, Ю.К. Рудавський

Анотація. Узагальнена обмінна *s-d* модель використовується для опису термодинамічних властивостей аморфного бінарного сплаву заміщення. Запропонована схема послідовного врахування вкладу структурних флуктуацій у термодинамічні функції. Побудовано функціонал термодинамічного потенціалу у формі функціонального степеневого ряду. Розрахунок конфігураційно засередненого термодинамічного потенціалу проведено у наближенні самоузгодженого поля (MFA) і наближенні хаотичних фаз (RPA). Із умов самоузгодження знайдені рівняння для намагніченостей та температури Кюрі переходу “парамагнетик–ферромагнетик”. Здійснено аналітичний і чисельний аналіз вказаних рівнянь, порівняння результатів із експериментальними даними по сплаву $\text{Co}_x\text{Gd}_{1-x}$.

The magnetization and critical temperature of amorphous binary alloy

L.A. Dorosh, G.V. Ponedilok, Yu.K. Rudavskii

Abstract. The generalized exchange *s-d* model for description of thermodynamical properties of dilute amorphous substitutional alloy is used. A scheme of consistent taking into account of the contributions of structural fluctuations to the thermodynamic functions is considered. The functional of the thermodynamic potential is constructed as a functional power series. The configurationally averaged grand thermodynamic potential of the model in the self-consistent field approximations (MFA) and random phase approximation (RPA) is calculated. Self-consistency conditions are given, from which equations for magnetizations and Curie temperature of the paramagnetic-ferromagnetic transition are obtained. The analytical and numerical analysis of equations, comparison results with experimental data for alloy $\text{Co}_x\text{Gd}_{1-x}$ is made.

1. Спін-електронна модель аморфного бінарного сплаву

Розглядається аморфна бінарна суміш N атомів в об'ємі $V \subset \mathbb{R}^3$: атоми сорту 1 володіють локалізованими магнітними моментами, а атоми сорту 0 не мають локалізованих магнітних моментів. Координати атомів $(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = \mathbb{R}^N \in V$ можуть приймати довільні випадкові значення. Кількісне співвідношення між числом магнітних і числом немагнітних атомів характеризується концентрацією c яка є постійним числом ($0 \leq c \leq 1$).

Мікроскопічна модель аморфного магнетика складається з двох взаємодіючих квантових підсистем – підсистеми локалізованих атомних спінів і підсистеми електронів провідності. Оператор Гамільтона моделі записується у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_{el} + \hat{H}_{el-s}. \quad (1)$$

Перший доданок описує гайзенбергівську енергію підсистеми локалізованих атомних спінів, що знаходяться у зовнішньому магнітному полі h :

$$\hat{H}_s = \frac{1}{2} N c S(S+1) J(|\mathbf{R}|=0) - g\mu_B h \sum_{1 \leq j \leq N} \tilde{c}_j S_j^z - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \Lambda} J_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \quad (2)$$

в термінах операторів

$$S_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \tilde{c}_j S_j^{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (3)$$

Тут \mathbf{S}_j – оператор спіна магнітного атома, що знаходиться в точці $\mathbf{R}_j \in V$. Зовнішнє магнітне поле h спрямоване вздовж осі OZ лабораторної системи координат. Функція заповнення точок простору магнітними атомами:

$$\tilde{c}_j = \begin{cases} 1, & \text{коли в точці } \mathbf{R}_j \text{ знаходиться магнітний атом,} \\ 0, & \text{коли в точці } \mathbf{R}_j \text{ знаходиться немагнітний атом.} \end{cases}$$

Електронна підсистема описується в рамках псевдопотенціального підходу. Гамільтоніан електронів провідності зручно записати у

представленні вторинного квантування, використовуючи плоскі хвилі $\varphi(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, де хвильовий вектор $\mathbf{k} \in \Lambda$. Імпульсний квазінеперервний простір

$$\Lambda = \{ \mathbf{k} : \mathbf{k} = \sum_{1 \leq \alpha \leq 3} 2\pi V^{-1/3} n_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}, \quad n_{\alpha} \in \mathbb{Z}, \quad (\mathbf{e}_{\alpha}, \mathbf{e}_{\beta}) = \delta_{\alpha\beta} \}$$

породжений заданням періодичних граничних умов на протилежних гранях куба об'єму V . З врахуванням процесів розсіяння електронів на іонах гамільтоніан електронної підсистеми

$$\hat{H}_{el} = \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \mathcal{E}_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \in \Lambda} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} W_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma} \quad (4)$$

Тут $a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} (a_{\mathbf{k}, \sigma})$ – ферміївські оператори народження (знищення) електронів у станах $\{\mathbf{k}, \sigma\}$. Індекс σ приймає значення, що відповідають двом можливим проєкціям електронного спіну на вісь квантування OZ . Спектр вільного електронного газу при наявності зовнішнього магнітного поля h :

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varkappa_{\sigma} \mu_B h, \quad (5)$$

де числовий коефіцієнт

$$\varkappa_{\sigma} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \sigma = \uparrow \\ -1, & \text{якщо } \sigma = \downarrow \end{cases}.$$

Отже, (5) задає початковий закон дисперсії електронів у двох енергетичних підзонах, зміщених одна відносно одної на величину $2\mu_B h$.

Потенціал розсіювання електронів провідності на іонах

$$W_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} w_{\mathbf{q}}, \quad w_{\mathbf{q}} = \frac{N}{V} \int_V d\mathbf{r} w(|\mathbf{r}|) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (6)$$

де $w(|\mathbf{r}|)$ – псевдопотенціал електрон-іонної взаємодії. Для локальних псевдопотенціалів матричний елемент $w_{\mathbf{q}}$ потенціалу розсіяння електронів на іонах залежить тільки від модуля імпульсу передачі \mathbf{q} .

Зауважимо, що ми маємо справу із двокомпонентною системою, яка містить в собі два сорти іонів, псевдопотенціали розсіяння електронів провідності на яких будуть різними, і під $w_{\mathbf{q}}$ ми будемо розуміти величину

$$w_{\mathbf{q}} = (1 - \tilde{c}_j) w_{\mathbf{q}}^{(0)} + \tilde{c}_j w_{\mathbf{q}}^{(1)},$$

де $w_{\mathbf{q}}^{(0)}$, $w_{\mathbf{q}}^{(1)}$ – псевдопотенціали розсіяння на немагнітних і магнітних іонах відповідно. Тоді фур'є-образ псевдопотенціалу

$$W_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \left[w_{\mathbf{q}}^{(0)} + \tilde{c}_j (w_{\mathbf{q}}^{(1)} - w_{\mathbf{q}}^{(0)}) \right]. \quad (7)$$

У зображенні вторинного квантування по плоских хвилях вільних електронів гамільтоніан спин-електронної взаємодії

$$\hat{H}_{el-s} = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q} \in \Lambda} I_{\mathbf{q}} \left[S_{\mathbf{q}}^z \hat{\sigma}_{-\mathbf{q}}^z + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{q}}^+ \hat{\sigma}_{-\mathbf{q}}^- + S_{\mathbf{q}}^- \hat{\sigma}_{-\mathbf{q}}^+) \right]. \quad (8)$$

Тут \hat{s}_i – векторний оператор спіна електрона, локалізованого у точці $\mathbf{r}_i \in V$. Декартові компоненти оператора спіна електрона $\hat{s}_j^\alpha = \hat{\sigma}_j^\alpha / 2$, $\alpha = x, y, z$, де $\hat{\sigma}^\alpha$ – матриці Паулі. У виразі (8) оператори $S_{\mathbf{q}}^\alpha$ означені формулою (3) з іншими індексами $\alpha = z, +, -$, де оператори перевороту спіна $S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y$.

У формулі (8) означені білінійні комбінації операторів народження і знищення електронів

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \frac{\varkappa_\sigma}{2} \hat{n}_{\mathbf{q},\sigma}, \quad \hat{n}_{\mathbf{q},\sigma} = \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} a_{\mathbf{k},\sigma}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}, \\ \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^+ &= \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} a_{\mathbf{k},\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^- = \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} a_{\mathbf{k},\downarrow}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow} \end{aligned} \quad (9)$$

Ермітовий оператор $\hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z$ має зміст фур'є-компонент оператора густини електронної спінової поляризації, а $\hat{n}_{\mathbf{q},\sigma}$ – фур'є-компоненти оператора повної електронної густини.

Припускається, що всі N атомів бінарного сплаву $A_c B_{1-c}$ є однаковими за своїми розмірами, мають однакові значення потенціалів міжйонних взаємодій. Відмінність між атомами проявляється лише в тому, що cN з них володіє локалізованими магнітними моментами, а решта не мають магнітних моментів. Основне припущення полягає в тому, що магнітні взаємодії суттєво слабші від взаємодій електростатичного характеру і тому не впливають на просторову конфігурацію атомів, або принаймні впливають незначно. За таких умов можна уникнути необхідності ідентифікації розподілу атомів різних сортів за допомогою додаткового сортового індексу.

Зручно означити величини

$$\varrho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{0}, \quad (10)$$

які є фур'є-коефіцієнтами флуктуацій густини атомів, а величини

$$\tilde{c}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \tilde{c}_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{0}, \quad (11)$$

пов'язані з фур'є-коефіцієнтами флуктуацій густини магнітоактивних атомів.

Структуру бінарної аморфної системи будемо описувати кореляційними функціями

$$K_n(\mathbf{k}_1; \dots; \mathbf{k}_n) = \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \right]^{2-n} \overline{\tilde{c}_{\mathbf{k}_1} \dots \tilde{c}_{\mathbf{k}_n}}^{\text{irr}}. \quad (12)$$

Тут $\overline{(\dots)}^{\text{irr}}$ – символ незвідного середнього. Схему розрахунку конфігураційних середніх твірних функціонал яких [1] описано в [2].

Кореляційна структурна функція другого порядку (12) у випадку просторово однорідної аморфної структури:

$$K_2(\mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2) = c[1 - c + cS_2(k_1)] \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{0}}; \quad (13)$$

$S_2(k)$ – бінарний структурний фактор системи, для якого можна взяти аналітичну форму, отриману для систем абсолютно твердих сфер у наближенні Перкуса-Івека:

$$\begin{aligned} \frac{1}{S_2(q)} &= 1 + \frac{24\eta}{(1-\eta)^4} \int_0^1 dx \frac{\sin(qx)}{q} \left[(1+2\eta)^2 x - \right. \\ &\quad \left. - 6\eta \left(1 + \frac{1}{2}\eta \right)^2 x^2 + \frac{\eta}{2} (1+2\eta)^2 x^4 \right]. \end{aligned}$$

Тут $\eta = \frac{\pi}{6} \varrho a^3$ – густина упаковки твердих сфер, a – діаметр атома.

2. Параметри порядку. Ефективний гамільтоніан

Термодинамічні властивості описаної спин-електронної моделі будемо розглядати в рамках концепції параметрів порядку. В цьому випадку необхідно провести деякі узагальнення. Це пов'язано з тим, що параметри порядку можна, а в деяких випадках і необхідно, визначати як функціонали випадкових структурних параметрів.

Введемо оператори флуктуацій намагніченості підсистеми атомних локалізованих спінів відносно середнього термодинамічного значення за формулою

$$\mathbf{Q}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ik\mathbf{R}_j} (\tilde{c}_j \mathbf{S}_j - \tilde{c}_j y \mathbf{e}_z). \quad (14)$$

Термодинамічне середнє значення спіну j -го атома залежить від просторової конфігурації системи, тобто є функціоналом координат всіх атомів: $\langle S_j^z \rangle_T = y_j (\tilde{c}_1 \mathbf{R}_1, \dots, \tilde{c}_N \mathbf{R}_N)$. Символ

$$\langle (\dots) \rangle_T = \text{Sp}_s \text{Sp}_e \left\{ (\dots) e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}_e - \Omega)} \right\} \quad (15)$$

тут і далі буде означати термодинамічне середнє за великим канонічним розподілом Гібса з повним гамільтоніаном моделі, Ω – термодинамічний потенціал, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обернена температура в енергетичних одиницях.

Будемо тут використовувати наближення, коли у формулі (14) термодинамічне середнє $y_j (\tilde{c}_1 \mathbf{R}_1, \dots, \tilde{c}_N \mathbf{R}_N)$ замінюється його конфігураційно середнім значенням $y = y_j (\tilde{c}_1 \mathbf{R}_1, \dots, \tilde{c}_N \mathbf{R}_N) \equiv \langle S_j^z \rangle_T$.

За такою ж схемою означимо оператори

$$\hat{\pi}_{\mathbf{q}}^\sigma = \begin{cases} \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z - \overline{\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z \rangle_T}, & \sigma = z \\ \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^\pm, & \sigma = \pm \end{cases}, \quad (16)$$

компонента $\hat{\pi}_{\mathbf{q}}^z$ якого описує флуктуації електронної спінової поляризації відносно середнього термодинамічного і конфігураційного значення. Величина

$$\overline{\sigma_{\mathbf{q}}^z} = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \frac{\varkappa_\sigma}{2} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}} \sum_{\mathbf{k}} \overline{\langle a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_T} = \frac{1}{2} (N_\uparrow - N_\downarrow) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}}, \quad (17)$$

де $N_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \overline{\langle a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_T}$ – середнє термодинамічне і конфігураційне значення повного числа електронів провідності з проекцією спіну σ на вісь квантування. Означимо величину електронної спінової поляризації одиниці об'єму в одиницях Бора за формулою

$$p = \frac{1}{2V} (N_\uparrow - N_\downarrow). \quad (18)$$

Тоді

$$\overline{\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z \rangle_T} = p V \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}}. \quad (19)$$

Формула (19) отримана за припущення, що в системі виникає лише просторова однорідна магнітна структура електронного газу, тобто $\overline{\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{q}}^z \rangle_T} = 0$ при всіх значеннях $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$. Таким чином, другим параметром порядку є величина p , яка описує електронну спінову поляризацію, що припадає на одиницю об'єму і визначатиметься самоузгоджено з умови мінімуму термодинамічного потенціалу.

В термінах операторів (14) і (16) повний гамільтоніан s - d моделі можна переписати у такій формі

$$\hat{H} = C + \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (20)$$

Тут неоператорна частина оператора Гамільтона

$$C = \frac{1}{2} c N S(S+1) J(0) + cypV I_0 + \frac{y^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} J_k \tilde{c}_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{-\mathbf{k}}. \quad (21)$$

Одночастинковий ефективний гамільтоніан, що описує енергію підсистеми вільних електронів провідності та енергію підсистеми локалізованих спінів в самоузгоджених полях, має вигляд

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{0e} + \hat{H}_{0s} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{E}}_{k,\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}^+ a_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{j=1}^N \tilde{h}_j \tilde{c}_j S_j^z. \quad (22)$$

Ефективне поле, що діє на спін атома, локалізованого точці \mathbf{R}_j

$$\tilde{h}_j = g\mu_B h + \frac{1}{\varrho} p I_0 + cy J_0 + \frac{y}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} J_{\mathbf{k}} (\tilde{c}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} + \tilde{c}_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}). \quad (23)$$

Параметр $J_0 \equiv \lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} J_{\mathbf{k}}$ характеризує інтенсивність обмінної спінової взаємодії. Для аморфної і кристалічної структури він визначається, відповідно, співвідношеннями

$$J_0 = \frac{N}{V} \int_V J(|\mathbf{R}|) d\mathbf{R}, \quad J_0 = \sum_j J(|\mathbf{R}_j|).$$

Перенормований за рахунок ефектів підмагнічування підсистемою атомних локалізованих спінів спектр електронного газу

$$\tilde{\mathcal{E}}_{k,\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varkappa_\sigma \left(\mu_B h + \frac{cy}{2} I_0 \right) + w_0. \quad (24)$$

Постійна величина

$$w_0 = \frac{N}{V} \int_V w(|\mathbf{r}|) d\mathbf{r} = (1-c)w_0^{(0)} + cw_0^{(1)}$$

– однорідний ефективний потенціал, обумовлений некулонівським характером псевдопотенціалу і не зникає за рахунок умови нейтральності, як це має місце у моделі точкових іонів. З умови термодинамічної стійкості псевдопотенціал повинен задовольняти додаткову умову $|w_0| < \infty$.

Оператор кореляційної взаємодії в (20)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} = & \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \widetilde{W}_{\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} J_k \mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \mathbf{Q}_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} I_q \left[Q_{\mathbf{q}}^z \hat{\pi}_{-\mathbf{q}}^z + \frac{1}{2} (Q_{\mathbf{q}}^+ \hat{\pi}_{-\mathbf{q}}^- + Q_{\mathbf{q}}^- \hat{\pi}_{-\mathbf{q}}^+) \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

До оператора \hat{H}_{int} віднесено доданок, що характеризує енергію розсіяння електронів на іонах. Однак тепер перенормований псевдопотенціал спин-електронного розсіяння має вигляд

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{\mathbf{q}, \sigma} = & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \left(w_q - \frac{\varkappa_{\sigma} \tilde{c}_j y}{2} I_q \right) = \\ = & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \left(w_q^{(0)} + \tilde{c}_j \left[w_q^{(1)} - w_q^{(0)} - \frac{\varkappa_{\sigma} y}{2} I_p \right] \right), \end{aligned} \quad (26)$$

тобто включає складову, що характеризує обмінну спин-електронну взаємодію. Природно, що такий псевдопотенціал вже залежить від орієнтації електронного спіну відносно осі квантування.

Побудову функціоналу термодинамічного потенціалу у формі функціонального степеневого ряду методом [3, 4] проведено в [2]. Після конфігураційного засереднення знайдено вираз для термодинамічного потенціалу

$$\begin{aligned} \Omega[\tilde{c}^N \mathbf{R}^N] = & \Omega_0 + \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}, \omega} \ln (1 + 4J_{\mathbf{q}0}^z K_2(\mathbf{q}) M_1^2(\beta h_0)) + \\ + & \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{q} \in \Lambda} \left[(w_{\mathbf{q}}^{(0)})^2 S_2(\mathbf{q}) + \left(2[w_{\mathbf{q}}^{(1)} - w_{\mathbf{q}}^{(0)}] - y I_q \right)^2 K_2(\mathbf{q}) \right] \chi^{zz}(\mathbf{q}, 0), \end{aligned} \quad (27)$$

тут параметри взаємодії

$$J_{\mathbf{k}0}^z = \beta \left(J_k + \frac{\beta}{2} I_k^2 \chi^{zz}(\mathbf{k}, 0) \right), \quad (28)$$

динамічна спінова сприйнятливість електронної підсистеми

$$\chi^{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma_1} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma_2}}{\omega + \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma_1} - \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}, \sigma_2}}. \quad (29)$$

Термодинамічний потенціал наближення самоузгодженого поля.

$$\begin{aligned} \Omega_0 = & \frac{1}{2} cN S(S+1) J(0) + cyp V I_0 + \frac{1}{2} c^2 y^2 N J_0 + \frac{y^2}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_q K_2(\mathbf{q}) - \\ & - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q} \in \Lambda} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \ln \left[1 + e^{-\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{q}, \sigma} - \mu)} \right] - \frac{cN}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\beta h_0 \frac{2S+1}{2})}{\sinh(\frac{1}{2} \beta h_0)} \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Функції $M_n(x)$ задовольняють рекурентні співвідношення

$$M_n(x) = \frac{d}{dx} M_{n-1}(x), \quad n \geq 1.$$

Тут функція

$$M_0(x) = \ln \left[\sinh \left(x \frac{2S+1}{2} \right) / \sinh \left(\frac{x}{2} \right) \right],$$

перша похідна $M_1(x) = S B_S(xS)$, де

$$B_S(x) = \left(1 + \frac{1}{2S} \right) \coth \left[\left(1 + \frac{1}{2S} \right) x \right] - \frac{1}{2S} \coth \frac{x}{2S}$$

– функція Бріллюена.

3. Намагніченість та критична температура спин-електронної моделі

Знайдемо рівняння для намагніченості у найпростішому наближенні, коли знехтувати вкладом структурних флуктуацій у термодинамічний потенціал (30), тобто приймемо, що кореляційні функції $K_n(\mathbf{k}_1; \dots; \mathbf{k}_n) \equiv 0$, $n \geq 1$.

З умови мінімуму термодинамічного потенціалу за параметром порядку y і означення поляризації одиниці об'єму p

$$\frac{d\Omega[\tilde{c}^N \mathbf{R}^N]}{dy} = 0, \quad p = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{1 + e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}, \uparrow} - \mu)}} - \frac{1}{1 + e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}, \downarrow} - \mu)}} \right], \quad (31)$$

а також рівняння для визначення хімічного потенціалу електронної підсистеми сплаву

$$\rho_e = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{1 + e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\uparrow} - \mu)}} + \frac{1}{1 + e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\downarrow} - \mu)}} \right], \quad (32)$$

де $\rho_e = N_e/V$ – густина електронів провідності, виведемо систему рівнянь для y , p та хімпотенціалу μ . При переході від суми до інтегралу за хвильовим вектором використаємо вираз для густини станів вільних електронів $\varrho(E) = \frac{3}{4} \frac{N_e \sqrt{E}}{E_F^{3/2}}$, де енергія Фермі електронного газу $E_F = (3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 \rho_e^{2/3} / 2m$. Друге рівняння (31) і (32) можна записати через відомий

$$F_{\frac{1}{2}}(\alpha) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + e^{x-\alpha}},$$

– інтеграл Фермі-Дірака. Остаточно система

$$\begin{aligned} M &= B_s \left(\frac{S}{T} \left[g\mu_B h + c S M J_0 + \frac{1}{2} P n_e I_0 \right] \right), \\ \frac{4}{3} \left(\frac{E_F}{T} \right)^{3/2} P &= F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{T} \right) - F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{T} \right), \\ \frac{4}{3} \left(\frac{E_F}{T} \right)^{3/2} \rho_e &= F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{T} \right) + F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{T} \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Тут величина $\xi = \mu_B h + c y I_0$. Приведена (нормована на величину локалізованого спіну) намагніченість атома $M = y/S$. В рівняннях (33) зроблено перехід до зручних при чисельних розрахунках величин: $P = 2pV/N_e$ – електронної спінової поляризації, що припадає на один електрон і яка може набувати в магнетонах Бора значень $P \in [-1; 1]$. Величина $n_e = N_e/N$ – число електронів, що припадає на один атом.

Намагніченості і критична температура неупорядкованої s - d моделі в наближенні RPA

З умов (31)–(32) з термодинамічним потенціалом (27) отримуємо систему рівнянь для намагніченостей y , p та хімпотенціалу μ . Для цього в перенормованому електронному спектрі [5]

$$\hat{\mathcal{E}}_{k,\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + (1-c)w_0^{(0)} + cw_0^{(1)} - \varkappa_{\sigma} (\mu_B h + c y I_0) +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(w_q^{(0)})^2 S_2(q) + \left(2(w_q^{(1)} - w_q^{(0)}) - y I_q \right)^2 K_2(q)}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}$$

виділимо структурно залежну складову

$$\hat{\mathcal{E}}_{k,\sigma} = \tilde{\mathcal{E}}_{k,\sigma} + \Delta_{k,\sigma},$$

де $\tilde{\mathcal{E}}_{k,\sigma}$ визначена (24), а поправку

$$\begin{aligned} \Delta_{k,\sigma} &= -\sqrt[3]{\frac{9}{64\pi^2 \rho_e}} \frac{1}{E_F k} \int_0^{\infty} dq q \ln \left| \frac{q-2k}{q+2k} \right| \times \\ &\times \left[(w_q^{nm})^2 S_2(q) + (2(w_q^{(1)} - w_q^{(0)}) - y I_q)^2 K_2(q) \right] \end{aligned}$$

можна розкласти в ряд за степенями модуля хвильового вектора

$$\Delta_{k,\sigma} = \sum_{n \geq 0} \tilde{\Delta}_{\sigma n} k^n.$$

Розкладемо другий вираз (31) і (32) у степеневий ряд за флуктуаціями $\Delta_{k,\sigma}$. Для цього скористаємося означенням оператора зсуву

$$f(\alpha(x+b)) = \exp\left(b \frac{d}{dx}\right) f(\alpha x),$$

де $f(x)$ – довільна аналітична функція. Обмежимося двома першими доданками

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{2V} \sum_k \left[\left(\frac{1}{e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\uparrow} - \mu)} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\downarrow} - \mu)} + 1} \right) - \right. \\ &\left. - \beta \left(\frac{\Delta_{k,\uparrow} e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\uparrow} - \mu)}}{(e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\uparrow} - \mu)} + 1)^2} - \frac{\Delta_{k,\downarrow} e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\downarrow} - \mu)}}{(e^{\beta(\tilde{\mathcal{E}}_{k,\downarrow} - \mu)} + 1)^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Останніх два доданки суттєво залежать від степеня n розкладу $\Delta_{k,\sigma}$ за хвильовим вектором і відмінні від нуля лише коли підінтегральна функція парна (тобто коли $\frac{n+1}{2} = 2k$, $k \in \mathbb{Z}$).

Для проведення чисельних розрахунків використано формулу динамічної сприйнятливості електронного газу в зовнішньому магнітному полі:

$$\chi^{\sigma\sigma}(q) = \frac{N_l}{N} \frac{3\beta}{8\mathcal{E}_F} \sqrt{1 + \varkappa_{\sigma} \frac{1}{2} M \frac{I_0}{\mathcal{E}_F}} F\left(\frac{q}{2k_F \sqrt{1 + \varkappa_{\sigma} \frac{1}{2} M \frac{I_0}{\mathcal{E}_F}}}\right). \quad (34)$$

де функція

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4x}(1-x^2) \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|.$$

Обмінні магнітні інтеграли взято у вигляді

$$J(r) = J \exp \left(-\alpha_1 \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \right); \quad J_p = J_0 \frac{\alpha_1^4}{(\alpha_1^2 + p^2)^2}, \quad p = ka_B;$$

$$I(r) = I \exp \left(-\alpha_2 \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \right); \quad I_p = I_0 \frac{\alpha_2^4}{(\alpha_2^2 + p^2)^2}.$$

Остаточно система рівнянь для y , p і μ в позначеннях із (33) має вигляд:

$$\begin{aligned} y \left[c^2 J_0 + \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{q_0}^z K_2(\mathbf{q}) \right] &= c^2 J_0 M_1(\beta h_0) \times \\ &\times \left[1 - \frac{4}{cN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{J_{q_0}^z K_2(\mathbf{k}) M_2(\beta h_0)}{1 + 4J_{q_0}^z K_2(\mathbf{k}) M_1^2(\beta h_0)} \right] + \\ &+ \frac{2\beta}{n} \sum_{\mathbf{q}} \left(w_q^{(1)} - w_q^{(0)} \right) I_q K_2(\mathbf{q}) \chi^{zz}(\mathbf{q}; c), \\ p &= \frac{3}{4} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \left[F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{k_B T} \right) - F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{k_B T} \right) \right] - \\ &- \frac{3}{4} \sum_{\substack{n \geq 0, \\ n=4k-1, k \in \mathbb{Z}}} (3\pi^2 \rho_e)^{\frac{n}{3}} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{\frac{n+1}{2}} (n+1) \times \\ &\times \left[\tilde{\Delta}_{\uparrow n} F_{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{k_B T} \right) - \tilde{\Delta}_{\downarrow n} F_{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{k_B T} \right) \right], \\ \rho_e &= \frac{3}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \left[F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{k_B T} \right) + F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{k_B T} \right) \right] - \\ &- \frac{3}{2} \sum_{\substack{n \geq 0, \\ n=4k-1, k \in \mathbb{Z}}} (3\pi^2 \rho_e)^{\frac{n}{3}} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^{\frac{n+1}{2}} (n+1) \times \\ &\times \left[\tilde{\Delta}_{\uparrow n} F_{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{\mu + \xi}{k_B T} \right) + \tilde{\Delta}_{\downarrow n} F_{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{\mu - \xi}{k_B T} \right) \right], \end{aligned} \quad (35)$$

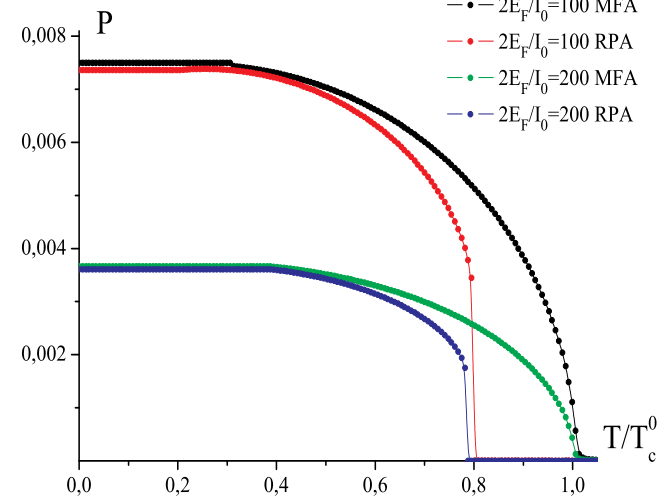
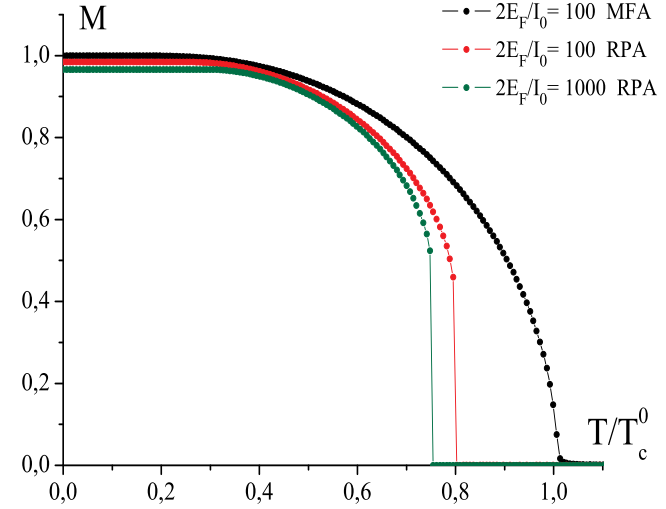


Рис. 1. Залежність намагніченості підсистеми локалізованих спінів і електронної спінової поляризації від температури при різних значеннях параметрів моделі.

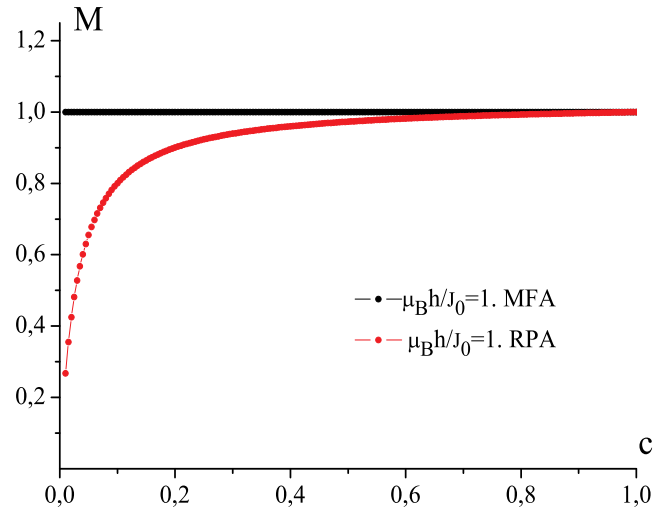


Рис. 2. Концентраційна залежність намагніченості і поляризації при наявності магнітного поля в різних наближеннях.

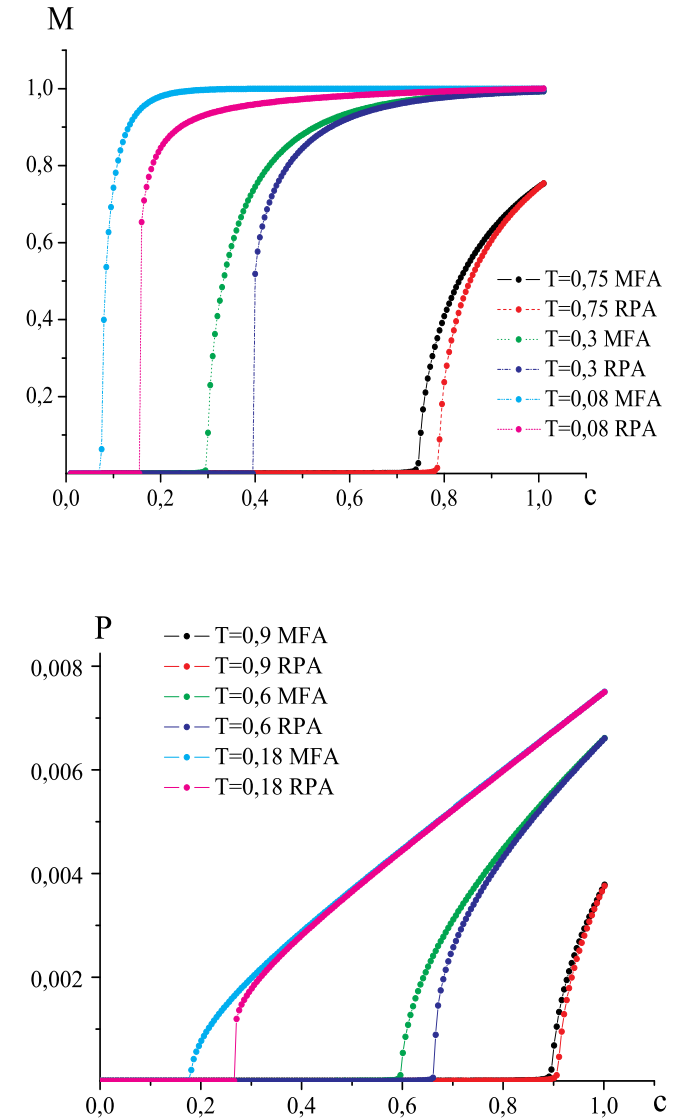


Рис. 3. Фазові діаграми намагніченості і поляризації при різних температурах (температура в одиницях критичної температури Гайзенберга).

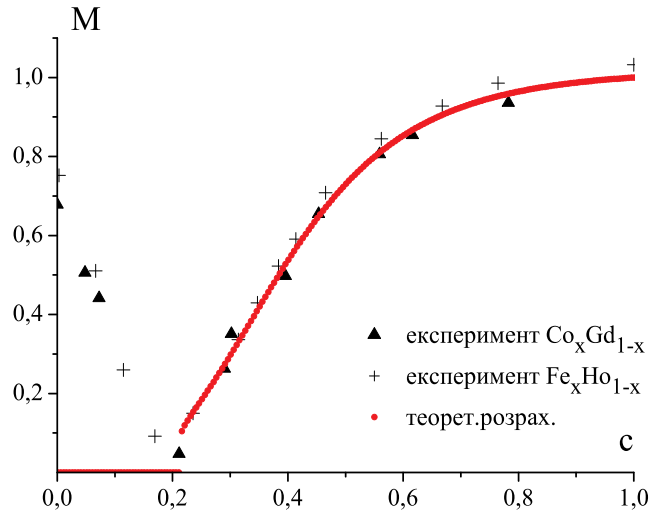


Рис. 4. Крива залежності намагніченості від концентрації магнітних домішок при температурі 10° К отримана в наближенні хаотичних фаз і дані експерименту з [6, 7].

тут позначено $h_0 = g\mu_B h + c S M J_0 + \frac{1}{2} P n_e I_0$.

У граничному випадку аморфного гайзенберґівського магнетика ($I \equiv 0$) у відсутності зовнішнього поля ($h = 0$) за умови $w_q^{(0)} = w_q^{(1)}$ із (35) отримуємо формулу намагніченості

$$c^2 J_0 [M_1(\beta c y J_0) - y] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} J_k K_2(k; c) \left(y + \frac{4\beta c J_0 M_1(\beta c y J_0) M_2(\beta c y J_0)}{1 + 4\beta J_k K_2(k; c) M_1^2(\beta c y J_0)} \right),$$

з якої для кристалу ($K_2(k) = 0$) виникне відома формула для намагніченості $y = M_1(\beta c y J_0)$.

Інший граничний випадок – класична s - d модель Шубіна-Вонсовського без гайзенберґівських взаємодій $J \equiv 0$ приведе до рівняння для електронної спінової поляризації

$$c \left[M_1 \left(\frac{1}{2} \beta n_e I_0 P \right) - y \right] = \frac{2\beta}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} \frac{I_k^2 \chi^{zz}(k; 0) K_2(k; c) M_1 \left(\frac{1}{2} \beta n_e I_0 P \right) M_2 \left(\frac{1}{2} \beta n_e I_0 P \right)}{1 + 2\beta I_k^2 \chi^{zz}(k; 0) K_2(k; c) M_1^2 \left(\frac{1}{2} \beta n_e I_0 P \right)},$$

яке у випадку кристалу буде $y = M_1 \left(\frac{1}{2} \beta n_e I_0 P \right)$.

Чисельне розв'язання систем для намагніченостей (33) (в наближенні MFA) і (35) (в наближенні RPA) дає можливість дослідити залежності нормованих на свої максимальні значення намагніченостей M і P від температури та концентрації при різних значеннях параметрів J_0 , I_0 , n_e , S , E_F , які для умови $w_q^{(0)} = w_q^{(1)}$ показані на рисунках 1–3. Температура наведена в одиницях $T_c^0 = c S(S+1) J_0/3$ – температур Кюрі гайзенберґівського магнетика у наближенні молекулярного поля.

Значення параметрів, які використані при проведенні розрахунків: $S = \{0.5; 1.; 1.5\}$; $I_0/J_0 = \{0.1; 0.5; 1.\}$; $2E_F/I_0 = \{100; 200; 500\}$; $\eta = 0.43 \div 0.45$; $n_e = 1.$; $\alpha_1 = 0.5$; $\alpha_2 = 1.$

Як видно із рис. 1, вклад електронної спінової поляризації у загальну намагніченість системи на порядок менша від вкладу намагніченості локалізованих магнітних моментів (загальної намагніченості системи вважатимемо $M_{total} = c N M + (1-c) N P \rho_{nm}^e + c N P \rho_m^e$, де ρ_m^e , ρ_{nm}^e – густина електронів на магнітному і немагнітному атомі відповідно); із врахуванням флуктуацій структури в більш точному наближенні RPA критична температура зменшується як для M так і для P симетрично, що вказує на їх взаємозв'язок і те, що фазовий перехід для них єдиний. Із збільшенням параметру спін-електронної взаємодії вклад спінової поляризації зростає. Залежність намагніченості від концентрації рис. 2 за наявності магнітного поля демонструє цікаві особливості в різних наближеннях: для наближення самоузгодженого поля намагніченість не залежить від концентрації.

Важливою характеристикою магнітних систем є температури фазових переходів. Знайдемо температуру переходу з неупорядкованої парамагнітної у впорядковану феромагнітну фазу, так звану температуру Кюрі T_c у випадку наближення самоузгодженого поля. Для цього покладемо зовнішнє магнітне поле рівним нулю. При $T \rightarrow T_c$ величина $\xi = c I_0 S M / 2 \rightarrow 0$. Позначимо $\mu_c = \mu(T = T_c)$. Розкладемо праві частини (33) в околі температури T_c у степеневі ряди і обмежимося лише лінійними за степенями M і m членами:

$$M = \frac{S(S+1)}{3 T_c} \left(c J_0 M + \frac{1}{2} P n_e I_0 \right), \quad (36)$$

$$\frac{4}{3} \left(\frac{E_F}{T_c} \right)^{3/2} P = 2 F_{\frac{1}{2}}' \left(\frac{\mu_c}{T_c} \right) \frac{c S I_0 M}{2 T_c},$$

$$\frac{4}{3} \left(\frac{E_F}{T_c} \right)^{3/2} = 2 F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_c}{T_c} \right).$$

Тут позначено $F'_n(x) = dF_n(x)/dx$. Оскільки два перші рівняння утворюють систему рівнянь однорідну відносно M та P , то для того щоб існували нетривіальні розв'язки головний визначник системи повинен бути рівним нулю. З цієї умови отримуємо рівняння для визначення температури Кюрі:

$$1 - \frac{cS(S+1)J_0}{3T_c} = \frac{cS(S+1)}{4\rho T_c^2} I_0^2 \left(\frac{T_c}{E_F}\right)^{3/2} F'_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu_c}{T_c}\right). \quad (37)$$

Подібним чином отримано рівняння для критичної температури в наближенні RPA:

$$\left[1 + \frac{1}{c^2 J_0 N} \sum_q \left\{ J_q + \frac{\beta}{2} I_q^2 \chi^{zz}(q; 0) \right\} K_2(q; c) \right] \frac{3T_c}{cS(S+1)J_0} = \\ = \left[1 + \frac{3\sqrt{T_c} I_0^2}{4\rho J_0 (E_F)^{3/2}} F'_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu_c}{T_c}\right) \right] \left(1 - \frac{4S(S+1)}{3cN J_0} \sum_k J_{\mathbf{k}0}^z K_2(k; c)\right). \quad (38)$$

Рівняння (37) і (38) трансцендентні. Можна оцінити деякі граничні випадки. Так при покладанні параметра I_0 рівним нулю, розв'язком рівняння (37) буде критична температура для ідеальної моделі Гайзенберга. Якщо прирівняти J_0 до нуля (класична s - d модель Шубіна-Вонсовського), то отримуємо таке рівняння

$$1 = \frac{cS(S+1)}{4T_c^2} I_0^2 \frac{1}{\rho} \left(\frac{T_c}{E_F}\right)^{3/2} F'_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu_c}{T_c}\right). \quad (39)$$

Скориставшись асимптотичним виразом для функції Фермі-Дірака знаходимо

$$T_c = \frac{cS(S+1)}{4} \frac{I_0^2}{E_F} \frac{1}{\rho}. \quad (40)$$

Аналогічно дістанемо оцінку і для повного рівняння (37)

$$\frac{T_c}{T_c^0} = 1 + \frac{9}{4} \frac{1}{cS(S+1)} \left(\frac{I_0}{J_0}\right)^2 \frac{1}{\rho} \frac{T_c^0}{E_F}. \quad (41)$$

Графіки порівняння чисельних результатів для критичної температури в RPA і наближенні самоузгодженого поля подано нижче.

Наближення самоузгодженого поля практично дублює лінійну залежність критичної температури від концентрації класичної Гайзенберівської моделі.

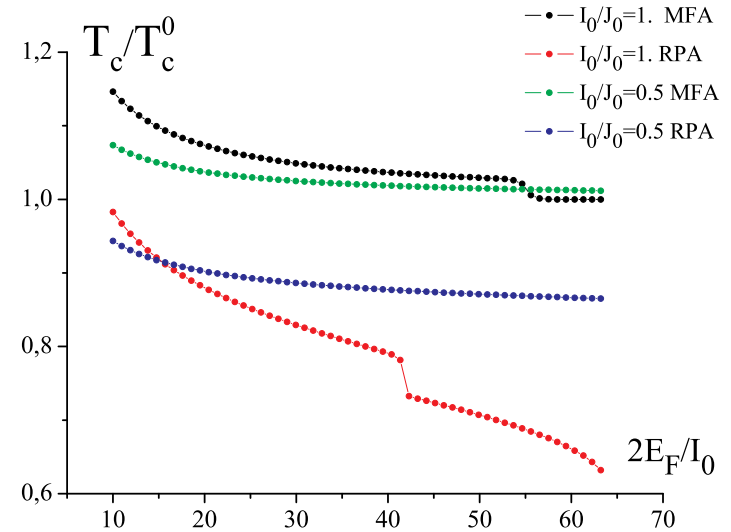
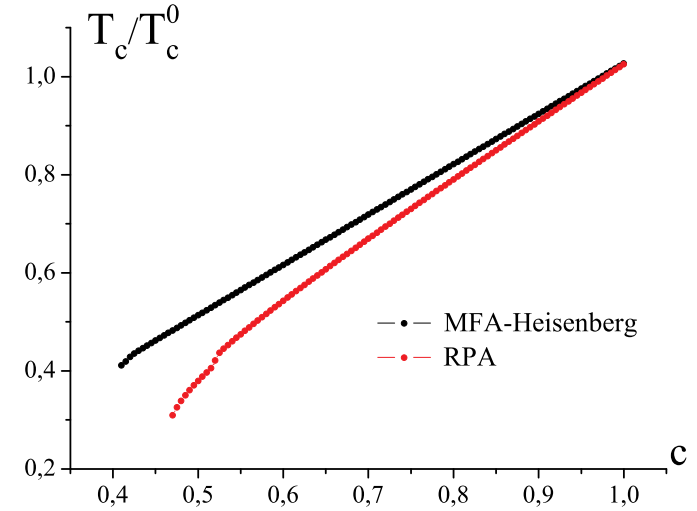


Рис. 5. Залежності температури Кюрі від концентрації магнітних домішок і параметру співвідношення енергії Фермі до інтеграла спин-електронної взаємодії.

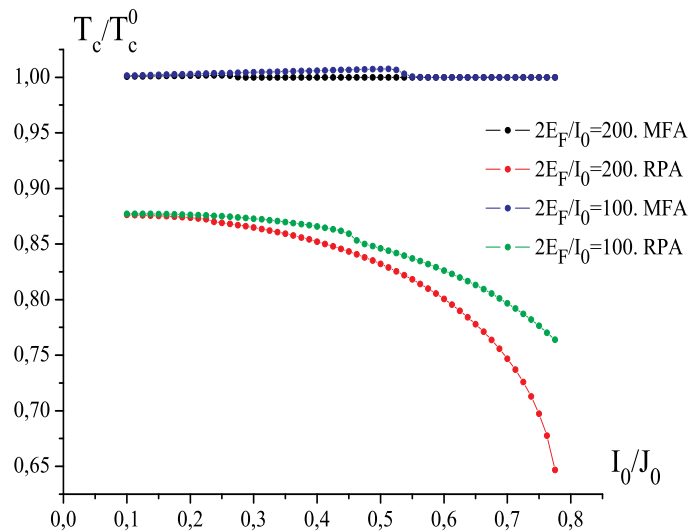


Рис. 6. Критична температура як функція співвідношення між інтегралами спин-спінової та спин-електронної взаємодії I_0/J_0 . Значення параметрів: $c = 0.5$; $\eta = 0.45$; $n_e = 1.$; $2E_F/I_0 = 200$.

Висновки

Запропонована схема виділення самоузгоджених середніх полів. Обчислений термодинамічний потенціал моделі у наближенні середнього самоузгодженого поля. Встановлено, що вклад M і P в загальну намагніченість системи росте із збільшенням концентрації магнітних домішок і з пониженням температури в системі. При якісному порівнянні результатів отриманих теоретичних результатів з даними експерименту по сплавах $\text{Co}_x\text{Gd}_{1-x}$ і $\text{Fe}_x\text{Ho}_{1-x}$ помітна добра збіжність до концентрації $c = 0.2$, оскільки межею застосовності даного наближення є малі концентрації.

Як видно з отриманих аналітичних виразів і з графіків, критична температура $s-d$ магнетика піднімається із збільшенням величини інтегралу спин-електронної взаємодії за квадратичним законом, що передбачає покращення його магнітостабільності з температурою.

Література

1. Yonezawa I.A., Morigaki K. Coherent potential approximation. – Prog. Theor. Phys. (Supplement). – 1973. – Vol.58, P.1–76.
2. Rudavskii Yu.K., Ponedilok G.V., Dorosh L.A. Thermodynamics of structurally disordered $s-d$ model // Condens. Matter Phys., 2005, Vol. 8, № 3 (43), P. 579–602.
3. Вакарчук І.А., Рудавський Ю.К. Метод функціонального інтегрування в теорії спинових систем // ТМФ. – 1981. – Т.49, С.234–247.
4. Vakarchuk I.A., Rudavskii Yu.K., Ponedilok G.V. Free Energy of the Amorphous Ferromagnets with Heisenberg Exchange Interaction and Liquid-Like Disorder // Phys. Stat. Sol. (b). – 1985. – Vol.128, №231, P.231–242.
5. Rudavskii Yu., Ponedilok G., Dorosh L. Electron density of states and spectrum of disordered $s-d$ model // Condens. Matter Phys. – 2001. – Vol.4, №1 (25), P.141–148.
6. Kaiser C., Panchula A., Parkin S.P. Finite tunnelling spin polarization at the compensation point of rare-earth-metal-transition-metal alloys // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol.95, P.472–475.
7. Hansen P., Klahn S., Clausen C., Much G., Witter K. Magnetic and magneto-optical properties of rare-earth transition-metal alloys containing Dy, Ho, Fe, Co // J. Appl. Phys. – 1991. – Vol.69, №5, P.3194–3207.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Людмила Анатоліївна Дорош
Григорій Володимирович Понеділок
Юрій Кирилович Рудавський

НАМАГНІЧЕНІСТЬ І КРИТИЧНА ТЕМПЕРАТУРА БІНАРНОГО
АМОРФНОГО СПЛАВУ

Роботу отримано 16 грудня 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені