

Перевод статьи

Спиновые флуктуации в неупорядоченных металлических ферромагнитных сплавах

Владимир И. Гребенников 1, 2 и Данил Радзивончик 1

¹Институт физики металлов УрО РАН, Россия

²Уральский федеральный университет, Россия

Аннотация. Предлагается теория для количественного описания термодинамических, магнитных и электронных свойств неупорядоченных сплавов переходных и нормальных металлов, например, системы Fe-Al, получаемой как из расплава, так и в виде метастабильных состояний, возникающих при механических воздействиях. Методом флуктуирующего поля исследована система коллективизированных *v*-электронов с двумя константами внутриатомного обменного взаимодействия. Принципиально новой особенностью системы является наличие нескольких типов ферромагнитных решений, переходы между которыми дают разнообразие температурных зависимостей магнитных характеристик неупорядоченных сплавов. В качестве приложения теории рассмотрены результаты расчета температурных зависимостей магнитных характеристик железоалюминиевых сплавов.

Введение

Для успешного описания магнитных свойств ферромагнитных металлов при конечных температурах требуется рассмотрение флуктуации плотности спина электрона (см, например, [1-4]). Хотя все теории спиновых флуктуаций сформулированы на первопринципном уровне, однако их окончательные реализации имеют существенные различия. Например, наш подход в корне отличается от динамической версии Какехаши одноузельной спиновых флуктуаций [3]. Во-первых, мы не ограничимся одной зонной модели, но рассматриваем все пять *d*-состояний атома переходного периода. Единое колебания обменного поля действует на полный спиновый момент, создаваемый суммарной плотностью электронов. Во-вторых, мы используем не одномерную модель Изинга для обменного поля, а рассматриваем 3D флуктуации вокруг в трехмерном пространстве. В-третьих, необходимым физическим принципом нашей теории является разделение спиновых флуктуаций на нулевые (высокая частота) и тепловые (низкочастотные) флуктуации в уравнении для когерентного потенциала. Колебания нулевой точки учитываются в DOS неэмпирических расчетах для реальных соединений, а не однозонной модели. Рассеяния электронов на тепловых флуктуациях почти не меняет их энергию, поэтому оригинальное интегральное уравнение для когерентного потенциала заменяется алгебраическим уравнением с заданной энергией. Микроскопическая трактовка спиновых флуктуаций, на основе метода функционального интегрирования, позволяет получить восприимчивость Кюри-Вейсса и разумную оценку для температуры Кюри [5, 6].

Намагниченность сплавов железа с алюминием, кремнием, оловом имеет сложную температурную зависимость часто не монотонного характера [7, 8]. Источником такого поведения является неэквивалентность магнитных атомов за счет различных ближайших соседей. Таким образом, обобщение теории спиновых флуктуаций в классе неупорядоченных металлических магнитных материалов – очень важная проблема. Для ее решения мы рассмотрим систему подвижных 3*d*-электронов с несколькими внутриатомных обменного взаимодействиями *u*. Наша цель состоит в том, чтобы вычислить

термодинамические характеристики электронной подсистемы (энтропия, теплоемкость) при произвольной температуре, найти значения локальных магнитных моментов на атомах различных типов, в результате чего намагниченность и ее изменение в магнитном поле, описать магнитные фазовые переходы. Проблема решается с помощью динамической теории флуктуаций электронной спиновой плотности [5, 9]. Его обобщение дает несколько ферромагнитные состояния, переходы между ними генерировать различные температурные зависимости магнитных свойств в неупорядоченных

Краткий формализм

В качестве приложения теории спиновых флуктуаций, как правило, рассматриваются ферромагнитные модели с одинаковыми магнитными атомами. Ниже мы приводим очень краткий и очень упрощенное изложение теории, описывающей сплавов с двух или более типов магнитных атомов. Рассмотрим систему подвижных 3d-электронов, которая характеризуется плотностью электронных состояний DOS $\nu(E)$ (см, например, рис. 2 (a)) и сильным внутриатомным обменным взаимодействием $H = -u_j s_j^2$, где S_j - спин электронов на номер атома J (суммирование по повторяющимся индексам подразумевается). Пусть константы u принимает два значения $u = \{U_1, U_2\}$ с вероятностями $C_j = \{c_1, c_2\}$ в зависимости от типа атома определяется его ближайшими соседями. Наш подход может быть легко расширена для большего числа типов атомов, но мы ограничимся только двух типов для простоты.

Используя преобразование Стратоновича-Хаббарда [1] для функции распределения мы уменьшаем нашу задачу к расчету характеристик зонных электронов перемещается в обменном поле $\bar{V}_j + \Delta V_j = (\bar{V}_{jz} + \Delta V_{jz})\tau_z + \Delta V_{jx}\tau_x + \Delta V_{jy}\tau_y$, где V стоит для среднего значения поля V_j на сайте J , ΔV_j обозначим его отклонения и τ являются 2×2 Паули спиновые матрицы.

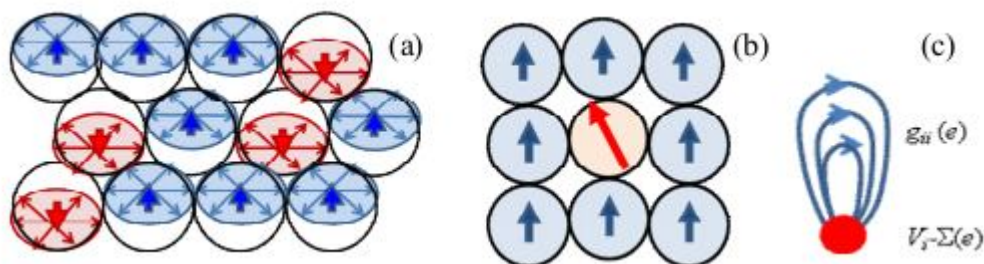


Рис. 1. (а) картина распределения средних значений (стрелки вверх и вниз) и колебания обменного поля на атомах двух типов. (б) центральный атом с полем V , встроенного в когерентного потенциала Σ среды (E) (синий стрелками вверх) и (с) диаграммы для многократного рассеяния на атоме.

Краткое описание основных уравнений теории спиновых флуктуаций в ферромагнитных сплавах приведено ниже. Значения средние поля на двух типах атомов описываются простым узнаваемым равенством

$$\bar{V}_j = -u_j \langle s_j \rangle. \quad (1)$$

Правая содержит среднее значение спина $\langle S_j \rangle$ (угловые скобки означают усреднение по тепловым колебаниям обменного поля, ΔV_j), который зависит как V_j и функции распределения флуктуаций, поэтому уравнения (1) образуют систему двух связанных уравнений. Спин определяется интегралом по энергии e мнимой части одноузельной ("примеси") функцией Грина и функцией Ферми $f(e)$

$$\langle s_j \rangle = \int \text{Im} \langle g[1 - (\bar{V}_j + \Delta V_j - \Sigma)g]^{-1} \rangle f de / \pi; \quad g(e) = \int v(e') [e - \Sigma(e) - e']^{-1} de'. \quad (2)$$

Средняя разовая сайт функция Грина $g(e)$ вычисляется для заданной плотности состояний $v(e)$ с использованием гомогенного когерентного потенциала $\Sigma(e)$. Базовые конфигурации поля и приближения, использованные в нашем подходе показаны на рисунке. Рис. 1 (а) показывает картину распределения для флуктуационного поля. Рис. 1 (б) показывает атома с полем V встроенной в эффективный кристалл, описываемый когерентным потенциалом $\Sigma(E)$, а также (с) схему процесса многократного рассеяния для расчета одноузельной функции Грина и когерентного потенциала,

$$\Sigma = \langle \langle V[1 - g(V - \Sigma)]^{-1} \rangle \rangle \quad (3)$$

который содержит полное усреднение по флуктуациям ΔV_j и типов атомов с концентрациями c_j .

Флуктуации поля имеют гауссово распределение. Средний квадрат значения флуктуаций ζ_j^2 определяется с помощью интегралов от функции бозе с динамической одноузельной спиновой восприимчивостью в $\chi_j(e)$, которая рассчитывается с использованием местной функции Грина, введенной в формуле (2). Оценка интегралов приводит к простым равенствам

$$\zeta_j^2 \approx \frac{u_j T}{\pi \lambda_j} \text{atan} \frac{\pi^2 u_j T \varphi_j}{6 \lambda_j}; \quad \lambda_j = 1 - u_j \chi_j(0); \quad \varphi_j = \text{Im} \frac{d \chi_j}{de} (e \rightarrow 0). \quad (4)$$

Практически вся зависимость от температуры T обеспечивается спиновыми флуктуациями ζ поскольку температурный эффект от распределения F Ферми (e) является незначительным.

Результаты и анализ

Отметим, что если мы пренебрежем флуктуациями и будем считать, что все атомы одинаковы, уравнения. 1-4 сводятся к уравнениям теории Стонера-Вольфарта ферромагнетизма [10]. Если мы возьмем во внимание спиновые флуктуации для одинаковых атомов, то придем к уравнениям теории спиновых флуктуаций зонного ферро магнетизма [2, 5].

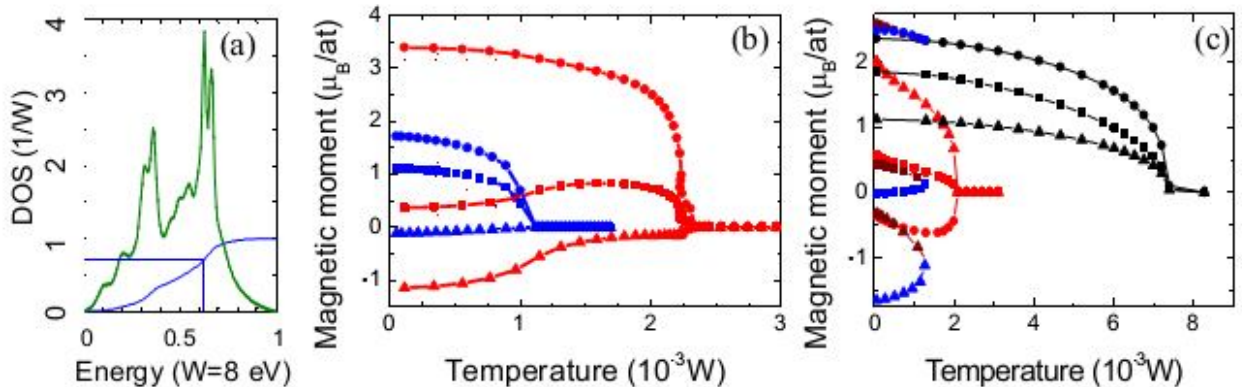


Рис. 2. (а) Немагнитная плотность состояний для неупорядоченных Fe3Al сплавов (синяя линия показывает интегрированный DOS). (б) магнитные моменты в зависимости от температуры, рассчитанной для системы с двумя типами атомов: константы $u = \{0,066, 0,086 \text{ Вт}\}$ и концентрации $c = \{0,67, 0,33\}$. Два вида растворов выделены, точки и треугольники показывают атомных магнитных моментов, площадей показывает их среднее значение. (с) Магнитные моменты типа двух магнитных атомов, разбавленных немагнитных

атомов: взаимодействия $U = \{0,132, 0,120, 0\}$ W , концентрации $c = \{0,2, 0,3, 0,5\}$. Четыре вида состояний будут выделены.

Проиллюстрируем новые свойства теории на примере расчета неупорядоченного сплава Fe3Al, нормализованная плотность состояний которого показана на рис 2 а. Там же приведена интегральная плотность состояний и энергия Ферми. За единицу энергии удобно принять полную ширину d-полосы $W= 8$ эВ. Пусть (предположим) система имеет два типа атомов железа с константами обменного взаимодействия $u_1=0.066 W$ и $u_2=0.086 W$, случайным образом распределенные по узлам кристаллической решетки. Концентрации их равны $c_1=0.67$ и $c_2=0.37$ соответственно. В этом случае уравнения 1-3 имеют два решения, представленные на рис 2 б. В первом случае (синие линии) магнитные моменты атомов (μ) при нуле температуры равны $m_1=-0.1$ и $m_2=1.7$, средняя намагниченность $m=1.1$. С увеличением температуры среднее значение этих моментов уменьшается до нуля при температуре Кюри $k_B T_{C1}=0.0011W= (T_{C1}=102 K)$.

Второе решение (красные линии) имеет большие антипараллельные магнитные моменты. При росте температуры сначала уменьшается средний магнитный момент атомов с малым u , пытаясь перейти в парамагнитное состояние при температуре 0.00125 , чему препятствует подмагничивание со стороны второй подсистемы, магнитный момент которой составляет при этом около 3. Температура парамагнитного перехода для этого состояния $=0.0022$. Обратим внимание на немонотонную температурную зависимость результирующей намагниченности, при низких температурах намагниченность растет, достигая максимума при $E=0.0015$, а затем падает. Еще более причудливо может выглядеть $\chi(E)$, если при низких температурах система находится в состоянии 1 (первое решение синяя линия), а при дальнейшем нагреве она переходит в красное состояние 2. В этом случае, как видно на рис. 2, функция $\chi(E)$ имеет два максимума и минимум. Кстати, такое поведение не редко наблюдается в системах.

Выводы

Мы разработали метод спиновых флуктуаций для описания термодинамических и магнитных свойств неупорядоченных сплавов в широком диапазоне температур от нуля до парамагнитного температуры перехода и выше. Сплав моделируется введением несколько типов атомов с различными константами взаимодействия внутри атомного обмена. Самосогласованного уравнения записываются для расчета характеристик зонных электронов, движущихся в поле равновесие и в переменном динамической поля, генерируемого тепловыми флуктуациями электронной спиновой плотности. В отличие от чистого железа уравнения имеют не одну, а несколько решений. Таким образом, электронная система может быть расположена в нескольких метастабильных состояниях, переходы между ними обеспечивают различные температурной зависимости магнитных свойств металлических сплавов.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ № 14-02-00080, 14-02-00260 and УрО РАН 12-U-2-1002.

Цитируемая литература

- [1] T. Moriya, Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism, Springer, Berlin, 1985.
- [2] V.I. Grebennikov, Spin-density correlations in paramagnetic iron, J. Magn. Magn. Mater. 84 (1990) 59-68.
- [3] Y. Kakehashi, Dynamical coherent-potential approximation to the magnetism in a correlated electron system, Phys. Rev. B 65 (2002) 184420 1-16.

- [4] N B Melnikov, B I Reser, V I Grebennikov. Spin-fluctuation theory beyond Gaussian approximation. *J. Phys. A: Math. Theor.* 43 (2010) 195004 1-19
- [5] V.I. Grebennikov, Dynamical theory of thermal spin fluctuations in metallic ferromagnets, *Physics of the Solid State* 40 (1998) 79-86.
- [6] V.I. Grebennikov, S.A. Gudin, Spin fluctuations and Curie temperature in the compounds R_2M_{17} with nonmagnetic elements, *Physics of the Solid State* 41 (1999) 67-72.
- [7] E.P. Yelsukov, G.N. Konygin, E.V. Voronina, A.V. Korolev, A.I. Ulyanov, S.K. Godovikov, A.V. Zagainov, Magnetic behavior of high Si(Sn) concentration nanocrystalline Fe-Si and Fe-St alloys obtained mechanical grinding, *J. Magn. Magn. Mater.*, 214 (2000) 258-268.
- [8] E.V. Voronina, E.P. Yelsukov, A.V. Korolev, Sch. Nagamatsu, T. Fujikawa, T. Miyanaga, The effect of disordering on magnetic properties of Fe-Al alloys, *Solid State Phenom.* 152-153 (2009) 15-18.
- [9] N.B. Melnikov, B.I. Reser, V.I. Grebennikov, Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism, *J. Phys.: Condens. Matt.*, **23** (2011) 276003 1-11.
- [10] E. P. Wohlfarth, *Ferromagnetic Materials*, vol. 1, North-Holland, Amsterdam, 1980.
- [11] S. J. Pickard, R. Nathans. Unpaired Spin Density in Ordered Fe_3Al , *Phys. Rev.* 123 (1961) 1163-1171.