Доклады Академии Наук СССР
1953. Том XCIII, № 3

ФИЗИКА

Е. КОНДОРСКИЙ и А. ПАХОМОВ

К ТЕОРИИ ЗАВИСИМОСТИ СПОНТАННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ В ОБЛАСТИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 30 IX 1953)

Одной из задач теории ферромагнетизма является вывод формулы для зависимости спонтанной намагниченности от температуры. Эта формула получена для идеального случая, именно для ферромагнитной решетки из слабо взаимодействующих водородоподобных атомов в области низких температур. В этом случае [1,2] удельная спонтанная намагниченность равна

$$\sigma_s = n\mu\left[1 - \left(\frac{T}{\theta'}\right)^{3/2}\right], \qquad (1)$$

где n — число атомов и число электронов на единицу массы; μ—магнетон Бора; $\theta' = 4{,}17\,(2c)^{2/3} J/k$, $c = 1/2$, 1, 2, соответственно для простой, пространственно-центрированной и гранецентрированной кубических решеток; J—интеграл обмена и k—постоянная Больцмана.

Реальные кристаллы ферромагнитных элементов имеют: 1) значительную электропроводность; 2) число электронов с нескомпенсированными магнитными моментами, не равное числу ионов решетки.

Теория ферромагнетизма с учетом полярных состояний и влияния электронов проводимости на спонтанную намагниченность развивалась в работах С. В. Вонсовского [3] и С. В. Вонсовского и Е. А. Турова. Слейтер [4] и в последнее время Стонер и Вольфарт [5] развивали теорию ферромагнетизма металлов, основанную на одноэлектронной модели. В этих теориях зависимость спонтанной намагниченности от температуры в области низких температур не рассматривалась.

Меллер [6] сделал попытку обобщить теорию непроводящей ферромагнитной решетки на случай, когда число электронов с нескомпенсированными магнитными моментами больше числа атомов, и получил формулу, подобную (1), с той разницей, что $\theta' = 4{,}17\,(2cz)^{2/3}\dfrac{zJ}{k}$, где z — число электронов с нескомпенсированными спинами на атом. В дальнейшем Гольдштейн и Примаков [7] вывели формулу для зависимости спонтанной намагниченности от температуры с учетом магнитного взаимодействия.

Ниже приводятся основные результаты работы, которая была проведена с целью получения теоретической зависимости спонтанной намагниченности от температуры в области низких температур для слабо проводящей решетки ферромагнетика, каждый атом которой имеет на незаполненных оболочках два электрона. Предполагается, что невозмущенные волновые функции электронов, принадлежащих атому f, могут быть представлены в виде $\psi_f^I\sigma_1$ и $\psi_f'\sigma_2$, где σ_1 и σ_2— спиновые функции, и при этом в общем случае ψ_f^I и ψ_f' — различные функции координат электронов (это могут быть разные функции для электронов, находящихся на одной оболочке, например $3d$-, или разные функции для электронов, находящихся на разных оболочках, например на $3d$- и $4s$-).

При нахождении низших энергетических уровней электронов в ферромагнитном кристалле мы используем метод приближенного вторичного квантования в форме, развитой Н. Н. Боголюбовым и С. В. Тябликовым [8] (см. также [2]).

Эквивалентный гамильтониан уравнения третьего приближения записывается в этом случае в форме

$$\tilde{H} = \tilde{G}_0 - \sum_{\substack{(f_1, f_2, g, g' \\ \sigma_1, \sigma_2)}} J(f_1 g, f_2 g')\, \hat{a}^{+}_{f_1 g \sigma_1} \hat{a}^{+}_{f_2 g' \sigma_2} \hat{a}_{f_2 g' \sigma_1} \hat{a}_{f_1 g \sigma_2}, \tag{2}$$

где $2J(fg, f'g')$ — интеграл обмена; $\hat{a}_{fg\sigma}$ — операторные амплитуды Ферми; индексы f означают номер атома; g — энергетическое состояние электронов атома (g может принимать условно значения 1 и 2, так как рассматриваются два наинизших уровня, которые могут занимать оба электрона в атоме); σ — спиновое состояние. Суммирование в (2) ведется по всем f и g, причем при $f = f'$ обязательно $g \neq g'$.

Низшее энергетическое состояние определяется из минимума квадратичной формы вида

$$\tilde{G}_0 - \sum_{\substack{(f_1, f_2, g, g' \\ \sigma_1, \sigma_2)}} J(f_1 g, f_2 g')\, \theta^*(f_1 g \sigma_1)\, \theta^*(f_2 g' \sigma_2)\, \theta(f_2 g' \sigma_1)\, \theta(f_1 g \sigma_2) =$$

$$= \min = E_0 \tag{3}$$

при дополнительном условии $\sum\limits_{(\sigma)} \theta^*(fg\sigma)\, \theta(fg\sigma) = 1$. Здесь $\theta(fg\sigma)$ — обычные c-числа, заменяющие операторы $\hat{a}_{fg\sigma}$.

Слабо возбужденное состояние определяется введением системы вспомогательных функций $\theta_0(fg\sigma)$, $\theta_\omega(fg\sigma)$, которые находятся из уравнений (см. [2], формула (4,186))

$$-2 \sum_{(f_2 g' \sigma_2)} J(f_1 g, f_2 g')\, \theta^*(f_2 g' \sigma_2)\, \theta(f_2 g' \sigma_1)\, \theta(f_1 g \sigma_2) = \lambda_\omega(f_1 g)\, \theta_\omega(f_1 g \sigma_1), \tag{4}$$

где $\lambda_\omega(fg)$ — эйлеровы множители.

В случае ферромагнетизма при $J(f_1 g, f_2 g') > 0$ уравнения (4) с учетом вариационного условия (3) удовлетворяются функциями

$$\theta_0(fg\sigma) = \delta(\sigma + {}^1/_2), \quad \theta_\omega(fg\sigma) = \delta(\sigma - {}^1/_2). \tag{5}$$

Индекс ω принимает значения 0,1, соответственно $\sigma = +{}^1/_2$ и $\sigma = -{}^1/_2$.

Гамильтониан (2) может быть преобразован при условии малости числа элементарных возбуждений [2] к виду

$$\tilde{H} = E_0 + 2 \sum_{(f_1 g)} \left\{ \sum_{(f_2 g')} J(f_1 g, f_2 g') \right\} \hat{b}^{+}_{f_1 g 1} \hat{b}_{f_1 g 1} - 2 \sum_{(f_1 g, f_2 g')} J(f_1 g, f_2 g')\, \hat{b}^{+}_{f_1 g 1} \hat{b}_{f_2 g_1}, \tag{6}$$

где $\hat{b}_{fg1} = \hat{a}^{+}_{fg0} \hat{a}_{fg1}$, $\hat{b}^{+}_{fg1} = \hat{a}^{+}_{fg1} \hat{a}_{fg0}$ — операторные амплитуды, подчиняющиеся статистике Бозе.

Гамильтониан (6) диагонализуется при помощи метода, разработанного С. В. Тябликовым [2]. Для диагонализации при $J > 0$ применяется преобразование

$$\hat{b}_{fg1} = \sum_{(\mu)} U_\mu(fg1)\, \hat{\xi}_\mu, \tag{7}$$

где $U_\mu(fg1)$ определяются системой уравнений

$$E_\mu U_\mu(fg1) = \left\{2 \sum_{(f'g')} J(fg, f'g')\right\} U_\mu(fg1) - 2 \sum_{(f'g')} J(fg, f'g')\, U_\mu(f'g'1) \quad (8)$$

и условием нормировки.

Решение системы (8), учитывая независимые изменения индексов g и g', выбираем в виде

$$U_\mu(fg1) = \frac{1}{\sqrt{N}}\, U_{\mu g} e^{i\mu f}. \quad (9)$$

Подставляя (9) в (8), получаем систему уравнений, однородную относительно $U_{\mu g}$, которая после коротких преобразований и введения обозначений

$$J_{gg'}(\mu) = \sum_{(f')} 2J(fg, f'g')\,(1 - e^{-i\mu(f-f')}),$$
$$I_{gg'} = \sum_{(f')} 2J(fg, f'g'), \quad I_g = \sum_{(g')} I_{gg'} \quad (10)$$

может быть приведена к форме:

$$E_\mu U_{\mu g} = \sum_{(g')} J_{gg'}(\mu)\, U_{\mu g'} + I_g U_{\mu g} - \sum_{(g')} I_{gg'} U_{\mu g'}. \quad (11)$$

Приравнивая детерминант этой системы нулю, получаем уравнение для E_μ, решение которого для частного случая $g, g' = 1, 2$ имеет вид:

$$E_\mu = \frac{1}{2}\{2 I_{12} + J_{11}(\mu) + J_{22}(\mu) \pm \sqrt{[J_{11}(\mu) - J_{22}(\mu)]^2 + 4\,[J_{12}(\mu) - I_{12}]^2}\}. \quad (12)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае получаются две системы возможных значений энергии (решение (11) имеет две ветви).

Принимая во внимание лишь интеграл обмена между ближайшими соседними атомами, разлагая (10) в ряд по μ и учитывая лишь первые члены разложения, получим

$$J_{11}(\mu) \cong 2a^2 J(f1, f'1)\,\mu^2 = a^2 J_{11}\mu^2, \quad J_{22}(\mu) \cong 2a^2 J(f2, f'2)\,\mu^2 = a^2 J_{22}\mu^2,$$
$$J_{12}(\mu) \cong 2a^2 J(f1, f'2)\,\mu^2 = a^2 J_{12}\mu^2, \quad (13)$$
$$I_{12} = 2J(f1, f2) + 12J(f1, f'2) = (J_{12}^0 + 6J_{12}),$$

где a — параметр кристаллической решетки; J_{11}, J_{22} — интегралы обмена между электронами соседних атомов, находящимися в одинаковых состояниях; J_{12}^0 — интеграл обмена между двумя электронами, находящимися в разных состояниях в одном и том же атоме; J_{12} — аналогичный обменный интеграл для двух ближайших соседей.

Тогда для значений энергии $E_\mu^{(1)}$ и $E_\mu^{(2)}$ получим выражения

$$E_\mu^{(1)} = \frac{a^2}{2}(J_{11} + J_{22} + 2J_{12})\,\mu^2, \quad E_\mu^{(2)} = (J_{12}^0 + 6J_{12}) + \frac{a^2}{2}(J_{11} + J_{22} - 2J_{12})\,\mu^2. \quad (14)$$

Гамильтониан $\tilde{H}$ приобретает диагональную форму:

$$\tilde{H} = E_0 + \sum_{(\mu)} E_\mu^{(1)} \hat{N}_\mu^{(1)} + \sum_{(\mu)} E_\mu^{(2)} \hat{N}_\mu^{(2)}, \quad (15)$$

где $\hat{N}_\mu^{(1)} = \overset{+}{\xi}{}_\mu^{(1)} \xi_\mu^{(1)}$, $\hat{N}_\mu^{(2)} = \overset{+}{\xi}{}_\mu^{(2)} \xi_\mu^{(2)}$ — числа заполнения, принимающие целые значения от нуля.

В том случае, когда $J_{12}^0 + 6J_{12} \gg kT$, после составления статистической суммы и проведения обычных расчетов, получим следующую формулу для температурной зависимости удельной спонтанной намагниченности:

$$\sigma_s = 2\mu n \left\{ 1 - \frac{1,306}{4c\pi^2} \left(\frac{2kT}{J_{11} + J_{22} + 2J_{12}} \right)^{3/2} - \frac{0,4431}{4c\pi^2} \left(\frac{2kT}{J_{11} + J_{22} - 2J_{12}} \right)^{3/2} e^{-(J_{12}^0 + 6J_{12})/kT} \right\}. \tag{16}$$

В силу указанного выше неравенства третий член в фигурной скобке мал по сравнению со вторым (за исключением случая, когда $J_{11} + J_{22} - 2J_{12} \ll kT$) и (16) практически приводит к тому же закону зависимости σ_s от температуры, что и формула (1) (дает „закон $^3/_2$“). При этом

$$\theta' = 4,17\,(4c)^{2/3}\, \frac{J_{11} + J_{22} + 2J_{12}}{2kT}. \tag{17}$$

В том случае, когда $J_{12}^0 + 6J_{12} \ll kT$, значения $E_\mu^{(1)}$ и $E_\mu^{(2)}$ сближаются и сливаются при $J_{12}^0 + 6J_{12} = 0$. Тогда расчет приводит к формуле

$$\sigma_s = 2\mu n \left\{ 1 - \frac{1,306}{4c\pi^2} \left(\frac{2kT}{J_{11} + J_{22}} \right)^{3/2} \right\}. \tag{18}$$

Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц (9) указали, что по известным из опыта данным о зависимости намагниченности от температуры при помощи формул, подобных (1), можно лучше оценить величины интегралов обмена, чем по данным о температуре Кюри. В последнее время были сделаны попытки (10,11) оценить подобным образом интеграл обмена для атома железа. При этом использовалась формула Меллера, в которой полагали $z = 2$, так как средний магнитный момент, приходящийся на один атом железа в ферромагнитном состоянии, приблизительно в два раза больше магнетона Бора. Эта оценка давала $J_{\mathrm{Fe}} \cong 200\,k$. Оценка по формуле (17) дает $J_{11} + J_{22} + 2J_{12} \cong 800\,k$. Если оба электрона находятся на одной оболочке, можно положить $J_{11} = J_{22} = J$, и тогда наша оценка дает $J_{11} + J_{12} \approx 400\,k$, т. е. при $J_{12} > 0$ $J < 400\,k$. При $J_{12} \approx J_{11} = J$ $J \approx 200\,k$.

Авторы весьма признательны С. В. Тябликову за плодотворную дискуссию и ряд ценных замечаний.

Институт физики
Московского государственного
университета
им. М. В. Ломоносова

Поступило
13 VIII 1953

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] F. Bloch, Zs. f. Phys., **61**, 206 (1930). [2] Н. Н. Боголюбов, Лекции по квантовой статистике, Киев, 1949. [3] С. В. Вонсовский, Я. С. Шур, Ферромагнетизм, М. — Л., 1948. [4] J. C. Slater, Phys. Rev., **52**, 198 (1937). [5] E. P. Wohlfarth, Phil. Mag., (7) **40**, 703 (1949). [6] Chr. Möller, Zs. f. Phys., **82**, 550 (1933). [7] T. Holstein, H. Primakoff, Phys. Rev., **58**, 1098 (1940). [8] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ, **19**, 256 (1949). [9] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Phys. Zs. d. Sowietunion, **7**, 292 (1935). [10] C. Kittel, Rev. Mod. Phys., **21**, 541 (1949). [11] Е. Кондорский, Изв. АН СССР, сер. физ., **14**, 398 (1952); Е. И. Кондорский, Л. Н. Федоров, там же, **14**, 432 (1952).