

ФИЗИКА

Е. КОНДОРСКИЙ и А. ПАХОМОВ

**К ТЕОРИИ ЗАВИСИМОСТИ СПОНТАННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ
МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ
В ОБЛАСТИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР***(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 17 III 1954)*

Слабо проводящая ферромагнитная решетка с z электронами на каждый атом. В работе (1) была получена формула для зависимости от температуры спонтанной намагниченности слабо проводящей ферромагнитной решетки, каждый атом которой имеет на незаполненной оболочке 2 электрона. При этом было показано, что число энергетических уровней удваивается по сравнению со случаем, когда каждый атом имеет на незаполненной оболочке один электрон.

Полученный в работе (1) результат можно обобщить на случай, когда каждый атом слабо проводящей ферромагнитной решетки имеет z электронов на незаполненной оболочке. В этом случае, приравняв детерминант системы (8) работы (1) нулю, получим для определения значений энергии E_μ уравнение степени z . Таким образом, число энергетических уровней будет в z раз больше, чем в случае, когда каждый атом решетки имеет один ферромагнитный электрон.

Для температурной зависимости спонтанной намагниченности ферромагнитной решетки с z электронами на атом получается, как показал проведенный нами расчет, следующая приближенная формула:

$$\sigma_s = zn_{\text{VB}} \left\{ 1 - \frac{A_1 (kT)^{1/2}}{z (\theta_1)} - \frac{A_2 (kT)^{1/2}}{z (\theta_2)} \exp\left(-\frac{\theta'_2}{kT}\right) - \dots - \frac{A_z (kT)^{1/2}}{z (\theta_z)} \exp\left(-\frac{\theta'_z}{kT}\right) \right\}, \quad (1)$$

где $A_1, A_2, \dots, A_z$ — некоторые константы $\sim 10^{-1}$,

$$\theta_1 = \frac{1}{z} \left\{ \sum_{i=1}^z J_{ii} + 2 \sum_{(i < j)=1}^z J_{ij} \right\}, \quad (2)$$

а $\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_z, \theta'_2, \theta'_3, \dots, \theta'_z$ — некоторые функции обменных интегралов $J_{ii}, J_{ij}, J_{ij}^0; J_{ij}^0$ — интеграл обмена между двумя электронами в одном и том же узле решетки.

Слабо проводящая ферромагнитная решетка бинарного сплава. Квантовая теория ферромагнитных сплавов в настоящее время еще мало разработана. С. В. Вонсовским (2) была получена приближенная формула для зависимости намагниченности бинарных сплавов от температуры вблизи точки Кюри и при низких температурах. А. А. Смирнов (3) получил ряд формул для электропровод-

ности кристаллической решетки упорядочивающихся бинарных сплавов.

В настоящей статье приводятся результаты произведенного нами расчета зависимости спонтанной намагниченности упорядочивающихся бинарных сплавов от температуры в области низких температур. Этот расчет был произведен тем же методом, что и расчет аналогичной зависимости для слабо проводящей решетки с z электронами на каждый атом; как и в расчете, описанном в (1) и в первой части настоящей статьи, для получения энергетического спектра решетки сплава мы использовали метод вторичного квантования в форме, развитой Н. Н. Боголюбовым и С. В. Тябликовым (4).

В общем случае кристалл бинарного ферромагнитного сплава состоит из N_A атомов одного и N_B атомов другого сорта. Атомы сорта A и B имеют, соответственно, z_A и z_B электронов, находящихся в различных состояниях g (g может принимать условные значения от 1 до z_A и от 1 до z_B). Всего в решетке имеется $n = N_A z_A + N_B z_B$ электронов.

Используя метод, аналогичный описанному в (1), можно преобразовать эквивалентный гамильтониан третьего приближения для рассматриваемой системы электронов к виду

$$\hat{H} = E_0 + 2 \sum_{(f_h, g)} \left\{ \sum_{(f_{h'}, g')} J(f_h, g, f_{h'}, g') \right\} \hat{b}_{f_h, g}^+ \hat{b}_{f_h, g} - \\ - 2 \sum_{(f_h, g, f_{h'}, g')} J(f_h, g, f_{h'}, g') \hat{b}_{f_h, g}^+ \hat{b}_{f_{h'}, g'}, \quad (3)$$

где $2J(f_h, g, f_{h'}, g')$ — интеграл обмена между электроном атома f сорта h , находящимся в состоянии g , и электроном атома f' сорта h' , находящимся в состоянии g' . Суммирование ведется по всем f и g , причем при $f = f'$ $g \neq g'$. $\hat{b}_{f_h, g}^+$ и $\hat{b}_{f_h, g}$ — операторные амплитуды Бозе.

Выражение (3) приводится к диагональному виду $\hat{H} = E_0 + \sum_{(\mu)} E_{\mu} \hat{\xi}_{\mu}^+ \hat{\xi}_{\mu}$ при помощи преобразования

$$\hat{b}_{f_h, g}^+ = \sum_{(\mu)} U_{\mu}^*(f_h, g) \hat{\xi}_{\mu}^+, \quad \hat{b}_{f_h, g} = \sum_{(\mu)} U_{\mu}(f_h, g) \hat{\xi}_{\mu}, \quad (4)$$

и при этом для определения E_{μ} , $U_{\mu}^*(f_h, g)$ и $U_{\mu}(f_h, g)$ получается система линейных однородных уравнений (см. (4))

$$E_{\mu} U_{\mu}(f_h, g) = \left\{ 2 \sum_{(f_{h'}, g')} J(f_h, g, f_{h'}, g') \right\} U_{\mu}(f_h, g) - \\ - 2 \sum_{(f_{h'}, g')} J(f_h, g, f_{h'}, g') U_{\mu}(f_{h'}, g') \quad (5)$$

и условия нормировки

$$\sum_{(f_h, g)} U_{\mu}^*(f_h, g) U_{\mu'}(f_h, g) = \delta(\mu - \mu'). \quad (6)$$

Система (5) содержит $n = N_A z_A + N_B z_B$ уравнений по числу возможных f_h и g , связывающих между собой n неизвестных $U_{\mu}(f_h, g)$. В общем случае все n неизвестных различны и, следовательно, раз-

личны все уравнения системы. Однако в частных случаях несколько уравнений (а иногда и все) могут по физическому смыслу задачи оказаться одинаковыми, и тогда порядок системы понижается. Например, в случае, когда все атомы f кубической решетки относятся к одному сорту (чистый металл с решеткой кубической системы), все n уравнений сводятся к системе z уравнений, как было указано в (1) и в первой части настоящей статьи. В случае чистого металла кубической системы с одним электроном на атом ($z = 1$) система (5) сводится к одному уравнению.

В решетке неупорядоченного сплава различные атомы f будут иметь различное число ближайших соседей обоих сортов, и, следовательно, их электроны будут находиться в сплаве в неодинаковых условиях. Число различных уравнений системы (5) может оказаться достаточно большим и будет определяться числом возможных комбинаций соседств атомов сорта A и B у каждого из атомов сплава. Отсюда следует, что степень уравнения для нахождения E_μ , которое получится после того, как мы приравняем нулю детерминант системы (5), и, следовательно, число возможных энергетических уровней E_μ будет тем больше, чем больше число электронов, находящихся в решетке сплава в различных условиях, в частности, чем менее упорядочена решетка сплава.

Из сказанного следует, что при упорядочении число возможных значений E_μ уменьшается и, следовательно, должен изменяться характер зависимости спонтанной намагниченности от температуры. Вычисления в общем случае бинарных сплавов весьма громоздки, и для зависимости спонтанной намагниченности от температуры удается получить лишь приближенные формулы.

Ниже приводятся несколько примеров частных случаев, когда расчет зависимости спонтанной намагниченности от температуры приводит к формулам простого вида.

1. Кубическая решетка сплава типа NaCl . Каждый атом имеет один электрон ($z_A = z_B = 1$). В этом случае система (5) вырождается в систему двух уравнений для двух значений индекса h . Для определения E_μ получается квадратное уравнение. Пренебрегая членами четвертой степени индекса относительно μ , получим в этом случае следующие значения E_μ :

$$E_\mu^{(1)} = J_{AB} a^2 |\mu|^2, \quad E_\mu^{(2)} = 12J_{AB} - J_{AB} a^2 |\mu|^2, \quad (7)$$

где a — параметр решетки и $J_{AB} = 2J(f_A, (f+1)_B)$ — интеграл обмена между электронами ближайших атомов сорта A и B .

Формула для температурной зависимости удельной спонтанной намагниченности при $J_{AB} \gg kT$ принимает вид:

$$\sigma_s = n\mu^B \left\{ 1 - \frac{1,306}{\pi^2} \left(\frac{kT}{J_{AB}} \right)^{3/2} - \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{kT}{J_{AB}} \right)^{3/2} \exp\{-\alpha\} \int_0^B \frac{x^2 dx}{\exp\{-x^2\} - \exp\{-\alpha\}} \right\}, \quad (8)$$

где $\alpha = 12J_{AB}/kT$, $B < (12J_{AB}/kT)^{1/2} = \alpha^{1/2}$. При низких температурах второй член практически не играет роли.

2. Кубическая решетка типа CsCl ($z_A = z_B = 1$). Здесь снова получаем квадратное уравнение для E_μ , решениями которого с точностью до членов с μ^4 являются:

$$E_\mu^{(1)} = J_{AB} a^2 |\mu|^2, \quad E_\mu^{(2)} = 16J_{AB} - J_{AB} a^2 |\mu|^2.$$

Для σ_s при низких температурах получается та же формула, что и в предыдущем случае, но $\alpha = 16J_{AB}/kT$.

3. Кубическая решетка состава AB_3 типа $FeNi_3$ ($z_A = z_B = 1$). В этом случае для E_μ получается уравнение 4-й степени. Формула для зависимости σ_s от температуры имеет вид:

$$\sigma_s = n\mu_3 \left\{ 1 - \frac{1,306}{\pi^2} \left(\frac{2kT}{J_{AB} + J_{BB}} \right)^{3/2} - A \left(\frac{kT}{\theta_2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_2'}{kT} \right) - \right. \\ \left. - B \left(\frac{kT}{\theta_3} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_3'}{kT} \right) - C \left(\frac{kT}{\theta_4} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_4'}{kT} \right) \right\}, \quad (9)$$

где A, B, C — постоянные порядка 10^{-1} , J_{AB} и $J_{BB} = 2J(f_B, (f+1)_B)$ — интегралы обмена между электронами соседних атомов; $\theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_2', \theta_3', \theta_4'$ — некоторые функции этих обменных интегралов.

Здесь, как и в предыдущих формулах, при низких температурах члены, содержащие экспоненциальные множители, роли не играют, и практически должен иметь место закон «трех вторых».

4. Кубическая решетка состава AB_3 типа $FeNi_3$. Число электронов у атомов компонент различно ($z_A = 2, z_B = 1$). В этом случае для нахождения спектра энергии E_μ имеем уравнение 5-й степени. Температурная зависимость удельной спонтанной намагниченности выражается формулой

$$\sigma_s = \frac{5}{4} n\mu_B \left\{ 1 - \frac{1,306}{5/4\pi^2} \left(\frac{5kT}{2(J_{AB}^{11} + J_{AB}^{21} + J_{BB}^{11})} \right)^{3/2} - B \left(\frac{kT}{\theta_2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_2'}{kT} \right) - \right. \\ \left. - C \left(\frac{kT}{\theta_3} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_3'}{kT} \right) - D \left(\frac{kT}{\theta_4} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_4'}{kT} \right) - E \left(\frac{kT}{\theta_5} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\theta_5'}{kT} \right) \right\}, \quad (10)$$

где B, C, D, E — постоянные $\sim 10^{-1}$; J_{AB}^{11}, J_{AB}^{21} — интегралы обмена между электронами соседних атомов сортов A и B , находящихся в одинаковых и различных энергетических состояниях; J_{BB}^{11} — интеграл обмена между электронами соседних атомов сорта B ; $\theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5, \theta_2', \theta_3', \theta_4', \theta_5'$ — некоторые функции указанных обменных интегралов и интеграла обмена $(J_A^{12})^0$ пары электронов, находящейся в атоме сорта A . Здесь также при $T \rightarrow 0$, в силу быстрого убывания экспонент, последние 4 члена быстро спадают и практического значения не имеют.

Московский государственный
университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
26 II 1954

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Е. Кондорский, А. Пахомов, ДАН, 93, 431 (1953). ² С. В. Вонсовский, ДАН, 26, 564 (1940); ЖТФ, 18, 131 (1948). ³ А. А. Смирнов, ЖЭТФ, 17, 730, 743 (1947). ⁴ Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ, 19, 251, 2:6 (1949).