Письма в ЖЭТФ, том 45, вып. 4, стр. 178 – 180 *25 февраля 1987 г.*

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ФЛУКТУАЦИОННО-ФОНОННЫЙ ПОДХОД К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

В.М. Зверев, В.П. Силин

Сформулирован термодинамический подход, позволяющий самосогласованно описать влияние намагничения на спектр колебаний решетки и влияние флуктуаций решетки на спонтанную намагниченность.

Роль фононных флуктуаций в теории ферромагнетиков с коллективизированными подвижными электронами рассматривалась в работах [1]. При этом температурная зависимость намагничения возникала благодаря тому, что фононный вклад δF_{ph} в рассматриваемую как функцию намагничения M, объема V и температуры T свободную энергию

$$F(V, T, M) = F(V, M) + \delta F_{ph}(V, T, M)$$

(где $F(V, M) = F(V, 0, M)$) оказывается зависящим от намагниченности благодаря учету соответствующей зависимости скорости звука. Такой учет в [1] проводился не на основе термодинамики, а на базе динамичного подхода. Однако, как в этом нетрудно убедиться, динамический подход фактически дает модуль всестороннего сжатия K_B при постоянной магнитной индукции, а не при постоянном намагничении, что является причиной непоследовательности подхода работ [1] и возникающих при этом парадоксальных следствий. Ниже в отличие от [1] излагаются результаты самосогласованного подхода, в котором используется модуль всестороннего сжатия при постоянном намагничении $K_M = V(\partial^2 F(V,M)/\partial V^2)_M$, что делает термодинамику последовательной. При этом возникают результаты качественно отличающиеся от результатов работ [1] и качественно отличающиеся от предсказаний стонеровской модели при $T \neq 0$.

Для простоты изложения рассмотрим слабый ферромагнетик с коллективизированными подвижными электронами, для которого, как известно, [2] независящее от температуры описание разумно дается теорией Стонера. Поэтому электронную свободную энергию примем в виде

$$F_e(V,M) = F_e(V) + A(V)M^2 + B(V)M^4,$$

где $A(V) = (1+2\psi\nu)V/4\beta^2\nu$, $B(V) = -V(\nu'/\nu^3)'/192\beta^4\nu$, ψ — постоянная обменного взаимодействия, ν — плотность энергетических состояний электронов на уровне Ферми, штрих означает производную по энергии ϵ_F, β — магнитный момент электрона. Мы полностью пренебрегаем температурной зависимостью обусловленной размытием уровня Ферми, учет которой является традиционным для теории Стонера.

Всю зависимость от температуры T будем связывать с решеточной частью свободной энергии, для которой используем выражение:

$$F_{ph}(V,T,M) = F_{ph}(V) + \mathcal{F}(V,T) + M^2\mathcal{P}(V,T).$$

Здесь $\mathcal{F}(V,T)$ — обычная температурная добавка к свободной энергии решетки, которая в простейших случаях [3] может быть проиллюстрирована формулами:

$$\mathcal{F}(V,T) = -V\frac{\pi^2(\kappa T)^4}{30(\hbar\bar{u})^3}, \quad T < T_D; \qquad \mathcal{F}(V,T) = N_A C\kappa T \ln\frac{\hbar\bar{\omega}}{\kappa T}, \quad T > T_D, \qquad (2)$$

где T_D — температура Дебая, C — теплоемкость на одну ячейку, N_A — число ячеек в решетке, $\bar{u}$ и $\bar{\omega}$ — средняя скорость звука и средняя частота колабаний решетки. Поскольку для ферромагнетиков известна зависимость скорости звука от намагничения по закону $\bar{u}(M^2) = \bar{u}(0) + \bar{u}'(0)M^2$, то естественно считать слагаемое $\mathcal{F}$, как возникающее от учета $\bar{u}(0)$ (и соответственно $\bar{\omega}(0)$), а коэффициент $\mathcal{P}(V,T)$, как возникающий при разложении по M^2. Поэтому в соответствии с (2) используем:

$$\mathcal{P}(V,T) = V\frac{\pi^2(\kappa T)^4}{10[\hbar\bar{u}(0)]^3}\,\frac{\bar{u}'(0)}{\bar{u}(0)}, \quad T < T_D; \qquad \mathcal{P}(V,T) = N_A C\kappa T\frac{\bar{\omega}'(0)}{\bar{\omega}(0)}, \quad T > T_D. \qquad (3)$$

Соответственно в формулах (2) $\bar{u} \to \bar{u}(0)$ и $\bar{\omega} \to \bar{\omega}(0)$. Таким образом, для самосогласованного флуктуационно-фононного подхода к теории ферромагнетизма воспользуемся свободной энергией вида:

$$F(V,T,M^2) = F_0(V) + \mathcal{F}(V,T) + M^2[A(V) + \mathcal{P}(V,T)] + M^4 B(V). \qquad (4)$$

Отсюда, в частности, для равновесного спонтанного намагничения следует $M^2 = -[A(V)/2B(V)] \times \{1 + \mathcal{P}(V,T)/A(V)\}$. Еще более важно то, что формула (4) позволяет самосогласованно определить сжимаемость как функцию M^2, а поэтому открывает возможность самосогласованно определить влияние намагничения на $\bar{u}$ и $\bar{\omega}$. Действительно, для модуля всестороннего сжатия формула (4) дает $K = V(\partial^2 F/\partial V^2)_{T,M} = K_0 + V(\partial^2\mathcal{F}/\partial V^2)_T + M^2 V(d^2A/dV^2)$.

Здесь учтен тот факт, что в отличие от малого A величина $A'' = d^2A/dV^2$ малой не является. Таким образом, можно сделать вывод о том, что $\bar{u}'(0)/\bar{u}(0) = C_u(V/K_0)A''$ и $\bar{\omega}'(0)/\bar{\omega}(0) = C_\omega(V/K_0)A''$, где C_u и C_ω — положительные постоянные порядка единицы.

Если в дополнение к (4) учесть вклад магнитной индукции $\mathcal{B}$; то можно записать отвечающее устойчивости ферромагнетика уравнение Белова – Арротта:

$$M^2(\mathcal{B}, T) + \frac{2\chi_0 M^2(0,0)\mathcal{B}}{M(\mathcal{B}, T)} = M^2(0,0)[1 - f(T)]. \qquad (5)$$

Левая часть этой формулы имеет стандартный вид, $M^2(0,0) = -A(V)/2B(V)$, что соответствует теории Стонера, а новое связано с функцией

$$f(T) = -(VA''/A)d\mathcal{F}/dK_0.$$

При этом, если ограничиться учетом влияния намагниченности только на продольную скорость звука u_l, то

$$\frac{d\mathcal{F}}{dK_0} = V\frac{\pi^2(\kappa T)^4}{60K_0(\hbar u_l)^3}, \quad T < T_D; \qquad \frac{d\mathcal{F}}{dK_0} = \frac{N_A C\kappa T}{2K_0}, \quad T > T_D. \qquad (6)$$

Проведенное рассмотрение позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, для ферромагнетиков, которые существуют при $T_c < T_D$, получаем следующее выражение для температуры Кюри

$$\kappa T_c \sim \left(\frac{\kappa T_D}{\epsilon_F}\right)^{3/4} \epsilon_F\,|\,1 + 2\psi\nu\,|^{1/4}. \qquad (7)$$

Во-вторых, если $T_c > T_D$, то

$$\kappa T_c \sim \epsilon_F\,|\,1 + 2\psi\nu\,|. \qquad (8)$$

При этом (7) и (8) существенно определяются свойствами решетки. В-третьих, для отношения барических производных $\xi = (d\ln M(0,0)/dP)/(d\ln T_c/dP)$ имеем $\xi = 2$ при $T_c < T_D$ и $\xi = 1/2$ при $T_c > T_D$. В стонеровском подходе $\xi = 1$. Если воспользоваться подходом Кима [1], то при $T_c > T_D$ имеем $\xi = 1/4$, а в случае $T_c < T_D$, который в подходе Кима не изучен, должно быть $\xi = 1$. В то же время, например, имеются такие известные ферромагнетики как $Zr(Fe_{0,3}Co_{0,7})_2$ и $Fe_{0,65}Ni_{0,35}$, у которых реализуются близкие к предсказываемым нами значения $\xi = 2{,}27$ и $\xi = 0{,}59$ соответственно при отвечающих нашей теории соотношениях между T_c и T_D [4]. Наконец, отметим, что согласно формуле (7) имеем $d\ln T_c/d\ln m_i = -3/8$, где m_i – масса атомов решетки. Это не противоречит экспериментальным данным [5]. Другая возможность бóльшего изотопического эффекта согласно [6] связывается с перенормировкой константы обменного взаимодействия ψ из-за нулевых колебаний, что, по-видимому, не подтверждается опытом [5]. Реальные температурные зависимости намагничения могут отличаться от описываемых формулой (6) в меру, например, отличия от законов T^4 и T температурной зависимости теплового расширения объема ферромагнетика. В эту же меру будут изменяться формулы (7), (8), отвечающие им значения ξ, а также и изотопический эффект.

Литература

1. *Kim D.J.* Phys. Rev. B, 1982, **25**, 6919; *Kim D.J., Tanaka C.* JMMM, 1986, **58**, 254.
2. *Уайт Р.* Квантовая теория магнетизма, М.: Мир, 1985.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика, М.: Наука, 1976, ч. I.
4. *Inoue J., Shimizu M.* Phys. Lett., 1982, **90A**, 85.
5. *Knapp G.S., Corenzwit E., Chu C.W.* Solid State Comm., 1970, **8**, 639.
6. *Hopfield J.J.* Phys. Lett., 1968, **27A**, 397.

Поступила в редакцию
22 октября 1986 г.

После переработки
19 декабря 1986 г.

Физический институт им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР