

*Письма в ЖЭТФ, том 17, вып. 1 стр. 41. — 44.*

*5 января 1973 г.*

**СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ  
КАК ПРИЧИНА  
АНИЗОТРОПИИ СПОНТАННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ  
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

*Е. И. Кондорский, Э. Штраубе*

Спин-орбитальное взаимодействие в магнитодиэлектриках с определенным типом симметрии кристаллических решеток, как было показано в работах Боровика-Романова [1], Дзялошинского [2] и затем Тревеса [3] и Мориа [4], является вместе с косвенным обменом причиной слабого ферромагнетизма. В этом случае оно ведет к малым отклонениям магнитных моментов подрешеток от направления вектора антиферромагнетизма, что приводит к слабой спонтанной намагниченности.

Расчеты, проведенные авторами настоящей статьи, показали, что спин-орбитальное взаимодействие в металлах также вызывает малые изменения абсолютной величины вектора спонтанной намагниченности

при повороте его относительно осей кристаллической решетки, хотя внутренний механизм явления несколько иной, чем в указанных магнитодиэлектриках. Именно, поворот результирующего магнитного момента относительно осей кристаллической решетки вследствие спин-орбитального взаимодействия вызывает в металлах изменение заселенности энергетических зон, в частности, зон с противоположным направлением спинов, что и приводит к анизотропии спонтанной намагниченности.

Анизотропия спонтанной намагниченности была впервые экспериментально обнаружена Обером [5] и затем изучена Обером и Эскудые [6]. Как было отмечено в работе [5], модель, предложенная Кэлленом и Кэлленом [7], не может объяснить существование анизотропии спонтанной намагниченности у монокристаллов никеля при низких температурах.

В настоящей работе анизотропия спонтанной намагниченности никеля при низких температурах определялась на основе зонной теории. Расчет проводился тем же методом, как и выполненный нами ранее расчет магнитной анизотропии энергии (см. [8, 9]). Ферромагнитный кристалл описывался приближенным гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V + V_{ex} + \frac{1}{2m^2c^2} \hat{\sigma} [\nabla V \times \hat{p}] - \frac{e}{2mc} H (2\hat{\sigma} + \hat{\ell}), \quad (1)$$

где  $H$  — напряженность магнитного поля и  $\hat{\ell}$  — оператор орбитального момента, а остальные обозначения такие же, как в формулах (1)–(3) нашей статьи [8]. Используя метод Хейборна и Зондгеймера [10], получим для спонтанной намагниченности

$$M(a_i) = \frac{N}{\Omega} \sum_n \int d^3r f \left\{ E_n(k, a_i) \right\} \langle n, k, a_i | \frac{e}{2mc} (2\hat{\sigma} + \hat{\ell}) | n, k, a_i \rangle, \quad (2)$$

где  $N$  — число элементарных ячеек кристалла,  $\Omega$  — объем зоны Бриллюэна,  $a_i$  — направляющие косинусы вектора намагниченности по отношению к осям кубической решетки,  $f$  — функция распределения Ферми. Сумма по  $n$  берется по собственным состояниям  $|n, k, a_i\rangle$  оператора  $\hat{\mathcal{H}}$  в отсутствие магнитного поля,  $E_n(k, a_i)$  — соответствующее собственное значение энергии. Как и при расчете анизотропии свободной энергии, здесь следует принять во внимание перераспределение свободных и занятых состояний вблизи уровня Ферми в зависимости от направления намагниченности. Для определения собственных значений и собственных функций гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}$  использовался метод, описанный в статье Ходжеса, Эренрейха и Ланга [11]. Численные расчеты  $M$  проводились с теми же параметрами зонной структуры, как и выполненные ранее расчеты константы анизотропии в [8], т. е. на основе зонной структуры, согласующейся с экспериментальными данными по эффекту де Хааз ван Альфена. Для постоянного спин-орбитального взаимодействия было принято значение  $\xi_{SO} = 7,5 \cdot 10^{-3} R_y$  определенное в работе [12].

Для орбитальной части намагниченности никеля нами было получено значение

$$M_{\ell} = 4,77 \cdot 10^{-2} \mu_B \text{ эл. яч.} \quad (3)$$

хорошо согласующееся с экспериментальными значениями:

$M_{\ell} = (5,07 \pm 0,27) \cdot 10^{-2} \mu_B / \text{эл. яч.}$  и  $M_{\ell} = 5,3 \cdot 10^{-2} \mu_B / \text{эл. яч.}$  полученными соответственно в работах [13, 14]. Это доказывает, что без влияния спин-орбитального взаимодействия орбитальный момент у никеля был бы полностью заморожен.

В анизотропную часть намагниченности  $\Delta M_{\sigma n} = M(111) - M(100)$  вносят вклады как спиновый, так и орбитальный момент.

Для анизотропных частей спиновой  $(\Delta M_{\sigma})_{\sigma n}$  и орбитальной  $(\Delta M_{\ell})_{\sigma n}$  намагниченностей никеля мы получили следующие теоретические значения

$$(\Delta M_{\sigma})_{\sigma n} = 1,59 \cdot 10^{-5} \mu_B / \text{эл. яч.}; \quad (\Delta M_{\ell})_{\sigma n} = 4,19 \cdot 10^{-5} \mu_B / \text{эл. яч.} \quad (4)$$

и для относительного значения анизотропной результирующей намагниченности

$$\Delta M_{\sigma n} / M = 0,82 \cdot 10^{-4}. \quad (5)$$

Полученное значение  $\Delta M_{\sigma n} / M$  находится в удовлетворительном согласии с экспериментальным значением Обера и Эскуды [5]:  $\Delta M_{\sigma n} / M = 1,92 \cdot 10^{-4}$ .

Следует отметить, что уменьшение объема карманов 4-й подзоны со спинами вниз, окружающих точки X зоны Бриллюэна, т. е. приближение принятой нами зонной структуры к зонной структуре, предложенной Цернбергом [15] (также на основе экспериментальных данных), улучшает согласие теоретических и экспериментальных значений

$\Delta M_{\sigma n} / M$ . Отметим еще, что как и в случае анизотропии энергии, заметные вклады в анизотропию спонтанной намагниченности дают только те области зоны Бриллюэна, в которых при выключении спин-орбитального взаимодействия имелись бы вырожденные или квазивырожденные состояния вблизи от уровня Ферми.

Московский  
государственный университет  
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию  
9 ноября 1972 г.

### Литература

- [1] А.С.Боровик-Романов, М.П.Орлова. ЖЭТФ, 31, 579, 1956.
- [2] И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 33, 1547, 1957; 33, 1454, 1957; J. Phys. Chem. Solid, 4, 241, 1958.
- [3] D.Treves. Phys. Rev., 125, 1843, 1962.
- [4] T.Moriya. Phys. Rev., 117, 635, 1960.

- [5] G.Aubert. J. Appl. Phys., 39, 504, 1968.
  - [6] G.Aubert, P.Escudier. J. de Phys., 32, Suppl. C-1, 545, 1960.
  - [7] E.R.Callen, H.B.Callen. J. Phys. Chem. Sol., 16, 310, 1960.
  - [8] Е.И.Кондорский, Э.Штраубе. ЖЭТФ, 63, 356, 1972.
  - [9] W.N.Furey. Thesis Harvard University, Cambridge, 1967.
  - [10] J.E.Helborn, E.H.Sondheimer. J. Phys. Chem. Sol., 13, 105, 1960.
  - [11] L.Hodges, H.Ehrenreich, N.D.Lang. Phys. Rev., 152, 505, 1966.
  - [12] L.Hodges, D.R.Stone, A.V.Gold. Phys. Rev. Lett., 19, 655, 1967.
  - [13] R.A. Beck, D.L.Fry. Phys. Rev., 184, 492, 1969.
  - [14] A.J.P.Meyer, G.Asch. J. Appl. Phys., 32, 3305, 1961.
  - [15] E.I.Zornberg. Phys. Rev., B1, 244, 1970.
-