

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НЕМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ СО СЛУЧАЙНО РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

*Е. З. Мейлихов**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 3 декабря 2003 г.

Построена обобщенная теория среднего поля для неупорядоченных систем с РККИ-взаимодействием, основанная на расчете и анализе функций распределения случайных магнитных полей, которые создаются нерегулярно распределенными в пространстве магнитными моментами. Эти функции распределения найдены двумя способами: аналитически и численно путем статистической обработки результатов вычисления случайных полей в модельной системе. Для металлов, разбавленных магнитными примесями, показано, что если концентрация примеси превышает некоторую критическую величину, зависящую от типа решетки металла и формы образца, то основное состояние системы становится магнитно-упорядоченным. Найдены магнитная фазовая диаграмма системы, температурная зависимость ее магнитной восприимчивости, концентрационная зависимость температуры Кюри, температурная и концентрационная зависимости намагниченности и магнитной части теплоемкости системы.

PACS: 75.30.Nx

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что введение магнитных примесей в немагнитную матрицу изменяет физические свойства композита (магнитную восприимчивость, теплоемкость и др.). Системы такого рода можно классифицировать по типу матрицы: 1) магнитные примеси в диамагнитном металле; 2) магнитные примеси в полупроводнике; 3) магнитные примеси в диэлектрике. Примером системы первого типа являются давно изучаемые металлические сплавы $\text{Cu}_{1-x}(\text{Mn}, \text{Fe})_x$, $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ [1], в которых взаимодействие магнитных моментов μ введенных примесей осуществляется через свободные носители заряда, имеющиеся в самой металлической матрице и практически не меняющие своей концентрации при введении примесей. К системам второго типа принадлежат разбавленные магнитные полупровод-

ники, такие, например, как $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ [2] или $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ [3], широко исследуемые в связи с тем интересом, который их свойства представляют для новых направлений электроники и особенно спинтроники. В этих системах свободные носители не только осуществляют взаимодействие между магнитными примесями, но ими же и поставляются. Системы третьего типа остаются диэлектрическими и после введения примесей, и потому магнитное взаимодействие в них является диполь-дипольным. Примером такой диэлектрической системы является $\text{LiY}_{1-x}\text{Ho}_x\text{F}_4$. Ее свойства изучены в [4] и здесь рассматриваться не будут.

Общим для всех этих систем является случайное расположение примесей в узлах исходной решетки. Известно, однако, что традиционная теория среднего поля неадекватно описывает свойства такой неупорядоченной (случайной) системы магнитных моментов [5]. Цель настоящей работы — обобщить теорию среднего поля для систем с косвенным

*E-mail: meilikhov@imp.kiae.ru

(через электроны проводимости) взаимодействием магнитных примесей с учетом случайного характера их пространственного распределения. Мы ограничиваемся изинговским приближением и полагаем, что косвенная связь между магнитными моментами примесных атомов осуществляется с помощью РККИ-взаимодействия через поляризацию свободных носителей заряда [2, 3, 6–8]. Магнитные свойства системы описываются с помощью функции распределения случайных эффективных локальных магнитных полей. Последняя определяется аналитически (для сильно разбавленных систем) или путем численных расчетов для модельной случайной системы изинговских магнитных моментов, расположенных в узлах кристаллической решетки матрицы. В реальных системах разброс этих полей оказывается столь значительным, что РККИ-взаимодействие преодолевает его «с трудом» и в состоянии обеспечить магнитное упорядочение лишь при гораздо более низких (по сравнению с предсказываемыми традиционной теорией среднего поля) температурах. Необычными оказываются также зависимости магнитных свойств таких систем от концентрации примесей.

Впервые указанный подход был предложен и использован в известной работе [7]¹⁾. Однако проведенный в ней анализ относился лишь к свойствам магнитно-неупорядоченного состояния. В этом случае, как полагали авторы, необходимо учитывать корреляцию магнитных моментов примесных атомов. Согласно их представлениям, эти моменты полностью или частично коррелированы, если расстояние между атомами менее некоторого корреляционного радиуса $R_c = 0.51x^{-1/3}a$, где a — размер кубической ячейки кристалла. Число примесных атомов в сфере радиусом R_c не зависит от их концентрации x и равно (не считая атома, расположенного в центре этой сферы) $(4\pi/3)R_c^3x \approx 2.3$. Магнитное поле на каждом атоме есть сумма двух независимых вкладов — «ближнего» поля атомов корреляционной сферы и «дальнего» поля всех остальных атомов. Каждое из этих полей характеризуется своей функцией распределения. Согласно этой схеме, тело состоит из небольших кластеров атомов с коррелированными моментами (среднее число атомов в кластере примерно равно 3.3), связанных РККИ-взаимодействием.

Далее, было принято, что функция распределения полей, создаваемых атомами внешней области

($R > R_c$), является гауссовской с максимумом при $H = 0$ и дисперсией $\sigma \propto x$. Функция распределения полей, создаваемых атомами корреляционной сферы, описывалась некоторым неявным соотношением, которое использовалось для численных расчетов. Общая функция распределения случайных магнитных полей в гранцентрированной кубической решетке, найденная для $x = 0.18$, оказывается такой, что ее максимальное значение (при $H = 0$) в четыре раза (!) меньше, чем без учета корреляций.

В рамках своего подхода авторы нашли, что рассматриваемые системы не могут быть магнитно-упорядоченными при концентрациях примесей $x < 0.05$. Это противоречит экспериментам с Pd(Co) [10], Pd(Fe) [11] и Au(Fe) [12], где ферромагнитное упорядочение наблюдается при $x_c < 0.01$. В [7] было также предсказано, что магнитная часть C_m теплоемкости таких систем не должна зависеть от концентрации примесей, что противоречит экспериментам с Cu(Co) [13] и Au(Co) [14], согласно которым $C_m \propto x^2$.

На наш взгляд, причина отмеченных расхождений состоит в том, что авторы работы [7] существенно переоценили роль корреляций. Чтобы убедиться в этом, достаточно сравнить результаты численных модельных расчетов функций распределения полей в магнитно-неупорядоченных системах двух типов: 1) с полной корреляцией моментов в пределах сферы радиуса R_c и 2) с отсутствием каких-либо корреляций этих моментов (см. ниже). Результат состоит в том, что максимальные значения соответствующих функций различаются не более чем на 5%. Кроме того, ясно, что использованный в [7] способ учета корреляций становится все менее пригодным по мере роста параметра магнитного порядка системы. В связи с этим мы полагаем, что качественное правильное описание свойств рассматриваемых систем возможно без учета корреляций магнитных моментов, но требует (в отличие от [7]) распространения метода на системы с ненулевой намагниченностью. При этом удастся получить результаты, в большей мере согласующиеся с экспериментальными данными.

Отметим также, что везде ниже мы пренебрегаем эффектом Кондо — антиферромагнитным взаимодействием электронов проводимости с магнитными примесями, приводящим к компенсации примесных магнитных моментов, т. е. считаем доминирующим косвенное РККИ-взаимодействие примесей. Такая ситуация, по-видимому, и реализуется [1] в некоторых немагнитных металлах с $3d$ -примесями типа Fe, Co (например, Au(Fe)).

¹⁾ Схожий подход для расчета случайных полей РККИ-взаимодействия предлагался в [9].

2. ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ

Энергию w_{RKKY} косвенного (через свободные носители заряда) обменного РККИ-взаимодействия двух параллельных спинов магнитных ионов, находящихся на расстоянии r друг от друга, запишем в виде [6]

$$w_{RKKY}(r) = -W\phi(2k_F r), \quad W = \frac{9\pi}{2} \frac{(nVJ)^2}{\varepsilon_F}, \quad (1)$$

$$\phi(y) = \frac{y \cos y - \sin y}{y^4} \exp\left(-\frac{y}{2k_F \ell}\right),$$

где J — энергия обменного взаимодействия спина со свободным носителем заряда; ε_F и k_F — фермиевская энергия и фермиевское волновое число свободных носителей заряда с концентрацией n и массой m , в модели стандартной зоны равные соответственно

$$\varepsilon_F = (\hbar^2/2m)(3\pi^2 n)^{2/3}, \quad k_F = (3\pi^2 n)^{1/3},$$

V — объем элементарной ячейки матрицы. Экспонента в выражении для $\phi(y)$ отражает конечную величину средней длины пробега ℓ свободных носителей заряда. Энергию w_{RKKY} можно представить как результат взаимодействия спина с эффективным локальным магнитным полем, равным

$$h(r) = h_J \phi(2k_F r), \quad h_J = W/\mu. \quad (2)$$

где μ — магнитный момент.

Пусть система, состоящая из случайно расположенных изинговских магнитных моментов (спинов), находится в состоянии, характеризуемом средней намагниченностью I . Локальные эффективные поля H_3 , создаваемые случайно расположенными спинами, различны в разных точках, и случайная величина H суммы всех таких полей может быть охарактеризована функцией распределения $F_x(j; H_3)$, которая зависит от относительной концентрации x

магнитных ионов и относительной намагниченности системы $j \equiv I/\mu N_\mu$. Здесь $N_\mu = xN$ — концентрация магнитных примесей, N — концентрация атомов матрицы, замещаемых примесями. Намагниченность j определяет среднюю долю $\eta = (1+j)/2$ спинов, ориентированных вдоль ее направления ($F_x(1; H_3)$ — функция распределения для случая, когда все спины параллельны друг другу).

Случайность распределения примесей ограничена тем, что они «вынуждены» располагаться лишь в определенных местах (узлах) матричной решетки. Для сильно разбавленных систем это ограничение несущественно и функция распределения случайных локальных полей может быть найдена с помощью метода Маркова [13], согласно которому

$$F(j; H) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(q) \exp(-iqH_3) dq, \quad (3)$$

где

$$A(q) = \lim_{N_{max} \rightarrow \infty} \left[\sum_{\zeta=\pm 1} \int_0^{r_{max}} \exp[iqh_\zeta(r, \zeta)] \tau(r, \zeta) dr \right]^{N_{max}},$$

где $h_\zeta(r, \zeta) = \zeta h(r) = \zeta w_{RKKY}/\mu$ — эффективное магнитное поле, которое создается в начале координат спином, удаленным от него на случайное расстояние r . Случайный параметр ζ принимает значения ± 1 (с вероятностью соответственно η и $(1-\eta)$) и определяет направление спина, $\tau(r, \zeta)$ — непрерывная функция распределения случайных значений расстояния r и параметра ζ , $N_{max} = 4\pi r_{max}^3 N_\mu/3$ — число примесей в сфере радиуса r_{max} , по объему которой проводится интегрирование. Если, далее, предположить, что распределения r и ζ равномерны, и пренебречь корреляцией магнитных моментов, то

$$\tau(r, \zeta) dpd\zeta = \begin{cases} [3r^2/(r_{max}^3 - r_{min}^3)] dr [(1-\eta)\delta(\zeta+1) + \eta\delta(\zeta-1)] d\zeta, & r > r_{min}, \\ 0, & r < r_{min}, \end{cases} \quad (4)$$

где учтено наличие минимально возможного расстояния $r_{min} \approx N^{-1/3}$ между магнитными ионами (при встраивании атомов примеси в кубическую подрешетку).

Подставляя (4) в (3), находим

$$A(q) = \exp[-4\pi x N C(q)],$$

$$C(q) = \int_{r_{min}}^{\infty} \{1 - \cos[qh(r)] - ij \sin[qh(r)]\} r^2 dr. \quad (5)$$

Из (5), в частности, следует, что в отсутствие намагниченности ($j = 0$) функция распределения $F_x(0; H_3)$ локальных полей четна, т. е. симметрична относительно $H_3 = 0$ (как и принималось в [7]).

Соотношения (5) не приводят к простому аналитическому выражению для функции распределения $F_x(j; H)$. Поэтому для определения последней мы использовали два взаимодополняющих метода: 1) «приближение малых q », основанное на том обстоятельстве, что в обратном фурье-преобразовании (3) область больших значений q не существенна и 2) численные расчеты для модельной случайной системы изинговских моментов.

В рамках первого подхода функции $\cos[qh(r)]$ и $\sin[qh(r)]$, подлежащие интегрированию в (5), заменяются своими приближенными степенными разложениями по малому аргументу qh (до первого не исчезающего по qh слагаемого). В этом приближении

$$C(q) = Pq^2 - ijSq, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} P &= \int_{r_{min}}^{\infty} h^2(r)r^2 dr = \frac{3}{8}W \frac{W}{\mu^2 k_F^3} \phi_P(2k_F r_{min}), \\ \phi_P(2k_F r_{min}) &= \int_{2k_F r_{min}}^{\infty} y^2 \phi^2(y) dy, \\ S &= \int_{r_{min}}^{\infty} h(r)r^2 dr = \frac{3}{4}\mu \frac{W}{\mu^2 k_F^3} \phi_S(2k_F r_{min}), \\ \phi_S(2k_F r_{min}) &= \int_{2k_F r_{min}}^{\infty} y^2 \phi(y) dy. \end{aligned} \quad (7)$$

Для $\ell = \infty$ имеем

$$\begin{aligned} \phi_S(y) &= -\frac{\sin y}{y}, \quad \phi_P(y) = \frac{1}{5} \left[\frac{2}{3} \left(\frac{\pi}{2} - \text{Si} 2y \right) + \right. \\ &+ \frac{(y \cos y - \sin y)^2}{y^5} + \frac{1 - \cos 2y - y \sin 2y}{3y^3} + \\ &\left. + \frac{\sin 2y - 2y \cos 2y}{6y^2} \right], \quad (8) \end{aligned}$$

где $\text{Si} 2y = \int_0^{2y} (\sin t/t) dt$.

Значения функций $\phi_P(2k_F r_{min})$ и $\phi_S(2k_F r_{min})$ для $\ell = \infty$ представлены на рис. 1. Из него, в частности, следует, что среднее направление случайного эффективного поля (положение максимума функции распределения $F_x(j; H)$), определяемое знаком параметра $\phi_S(2k_F r_{min})$, зависит от типа решетки:

для объемноцентрированной (*bcc*) и гранецентрированной (*fcc*) кубических решеток оно совпадает с направлением средней намагниченности ($H_j > 0$), а для простой кубической (*sc*) решетки — противоположно ему ($H_j < 0$).

Функции $\phi_P(2k_F r_{min})$ и $\phi_S(2k_F r_{min})$ существенно зависят от длины пробега носителей только при $\ell/a \lesssim 10$ (см. вставку на рис. 1). Поэтому в «хорошем» металле (в котором $\ell/a \gg 1$) этой зависимостью можно пренебречь.

Подставляя (5) в (3), убеждаемся, что в рассматриваемом приближении распределение $F_x(j; H_3)$ описывается сдвинутой (относительно $H = 0$) гауссовской функцией:

$$\begin{aligned} F_x(j; H_3) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(H_3 - jH_j)^2}{2\sigma^2} \right], \\ H_j &= -4\pi xNS \propto x, \\ \sigma &= (4\pi xNP)^{1/2} \propto x^{1/2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Ширина σ этого распределения пропорциональна \sqrt{x} и определяется параметром P , а положение максимума ($H = jH_j$) — параметром S . С уменьшением намагниченности максимум распределения $F_x(j; H)$ линейно сдвигается в сторону меньших (по абсолютной величине) полей, а его ширина остается неизменной. Экспоненциально спадающие крылья гауссовской функции распределения соответствуют малой вероятности появления сильных локальных полей, для которых $qh \gtrsim 1$. Такое приближение хорошо применимо, когда концентрация x магнитных ионов мала (см. ниже). Величина параметра $2k_F r_{min}$ зависит от типа решетки. Для систем первого типа (немагнитные металлы с примесями) соответствующие значения характерных параметров для одновалентных металлов с кубической решеткой периода a приведены в таблице.

Для металлов с гранецентрированной кубической решеткой (Cu, Ag, Au, Pd) соотношения (9) для сдвига H_j функции распределения $F_x(j; H_3)$ и ее ширины σ можно записать в виде

$$\begin{aligned} H_j &= \left| x \frac{\phi_S(2k_F r_{min})}{\pi} \right| h_J, \\ \sigma &= \left[x \frac{\phi_P(2k_F r_{min})}{2\pi} \right]^{1/2} h_J. \end{aligned} \quad (10)$$

Соответствующие зависимости $H_j(x)$ и $\sigma(x)$ для одновалентного металла с гранецентрированной кубической решеткой приведены на рис. 2 (штриховые линии).

Модельная система создавалась путем равномерно-случайного размещения в узлах кубической

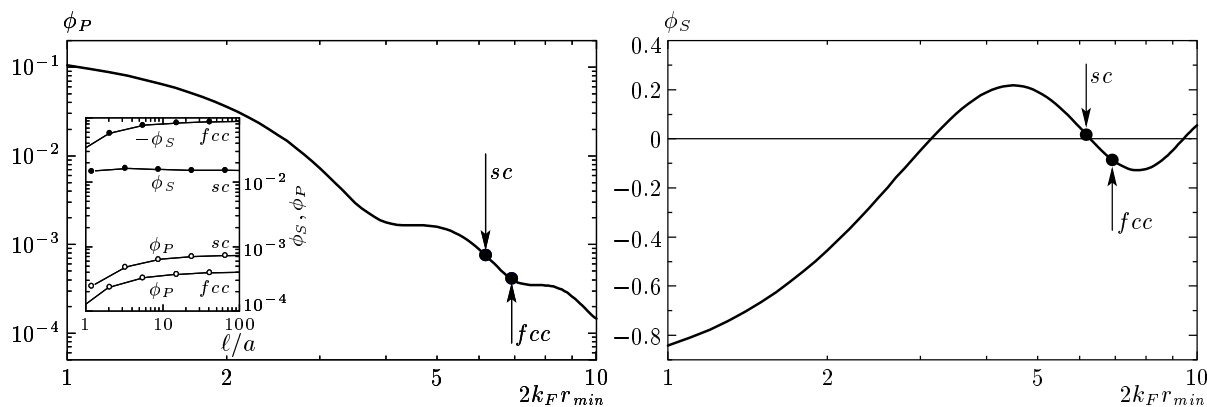


Рис. 1. Функции $\phi_P(2k_F r_{min})$ и $\phi_S(2k_F r_{min})$ для кубических металлов ($\ell = \infty$). На вставке — зависимости этих функций от длины пробега носителей

Существенные параметры, определяющие свойства одновалентных металлов с кубической решеткой

Параметры	Тип решетки		
	<i>sc</i>	<i>bcc</i>	<i>fcc</i>
r_{min}/a	1	$\sqrt{3}/2$	$1/\sqrt{2}$
Na^3	1	2	4
Nr_{min}^3	1	1.30	1.41
$2k_F a$	6.19	7.79	9.80
$2k_F r_{min}$	6.19	6.75	6.94
$\phi_S(2k_F r_{min}), \ell = \infty$	-0.0150	0.0667	0.0880
$\phi_P(2k_F r_{min}), \ell = \infty$	$7.43 \cdot 10^{-4}$	$4.54 \cdot 10^{-4}$	$4.23 \cdot 10^{-4}$

решетки (с общим числом узлов 10^4-10^5) спинов с соотношением магнитных моментов, направленных «вверх» и «вниз», которое определялось выбранным значением относительной намагниченности $0 \leq j \leq 1$. После этого магнитное поле H_3 в центральном узле решетки рассчитывалось с помощью выражения (1), а функции $F_x(j; H_3)$ находились путем перебора большого числа (около 10^4) реализаций такой системы.

При проверке результата работы [7] процедура несколько менялась: в системе с нулевой намагниченностью выделялась окружающая центральный узел квазисферическая область, которая содержала необходимое число узлов²⁾ и внутри которой все примеси создавали магнитное поле, совпадающее по на-

правлению с моментом примеси в центральном узле. Тем самым имитировалась предсказанная в [7] корреляция магнитных моментов³⁾. Результат одного из таких расчетов приведен на рис. 3. Он показывает, что хотя функция распределения магнитных полей «чувствует» наличие корреляций, ее общий вид сохраняется, а максимальное значение меняется весьма незначительно (при $x = 0.02$ не более чем на 5%). Это означает, что роль корреляций в [7] значительно переоценена и при расчете функций распределения $F_x(j; H_3)$ ею можно пренебречь.

Эволюция найденной таким образом функции распределения $F_x(1; H_3)$ с изменением концентрации x магнитных ионов в металлической границе-

²⁾ Согласно [7], это число зависит от концентрации примесей и составляет $2.3/x \sim 100$.

³⁾ Учет подобной корреляции для узлов, находящихся вне выделенной сферы, является излишним ввиду их значительной удаленности от центрального узла.

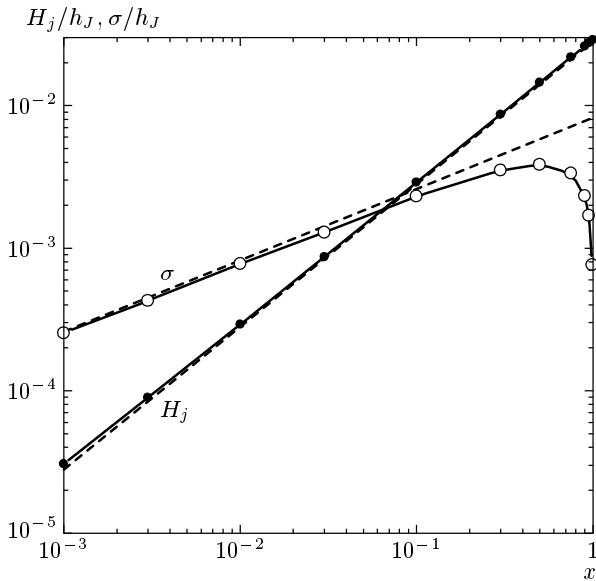


Рис. 2. Концентрационные зависимости параметров H_j и σ гауссовской функции $F(1; H_3)$ распределения эффективных магнитных полей, являющихся результатом РККИ-взаимодействия магнитных ионов, расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла. Точки — численный расчет, штриховые прямые — аналитическое приближение малых q при $\ell = \infty$

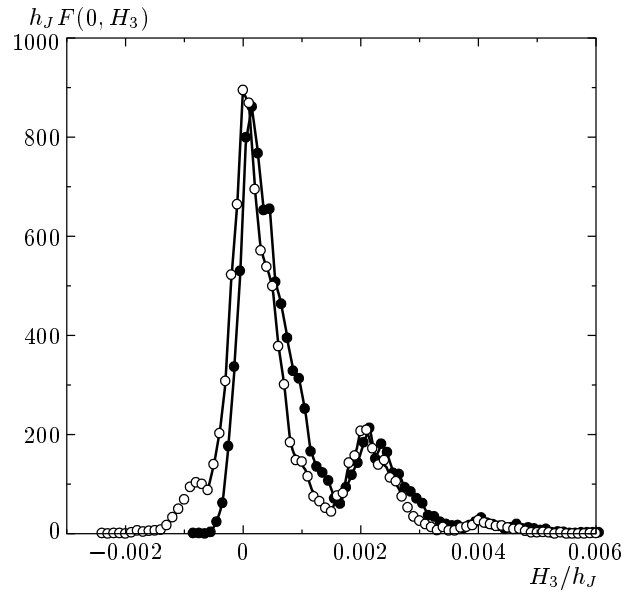


Рис. 3. Функции распределения $F(0; H_3)$ для систем с коррелированными (\bullet) и некоррелированными (\circ) магнитными моментами примесей с концентрацией $x = 0.02$, расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла ($\ell = \infty$). Результаты получены численным моделированием

трированной кубической решетке показана на рис. 4. Аппроксимируя их гауссовскими функциями, можно найти соответствующие значения параметров H_j и σ , концентрационные зависимости которых представлены на рис. 2 (точки). Видно, что приближение малых q дает правильные значения H_j при любых концентрациях x , но для вычисления σ его можно использовать только при достаточно малых концентрациях $x \lesssim 0.1$. Впрочем, реальные системы практически всегда удовлетворяют этому условию.

3. ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ ДЛЯ СИСТЕМ С РККИ-ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Традиционной теории среднего поля, относящейся к регулярной системе, соответствует δ -образная (при любом значении намагниченности j) функция распределения

$$F_x(j; H_3) = \delta[H_3 - H_0(x, j)].$$

Понятно, что уширение этого распределения в случайной системе является фактором, «мешающим»

ферромагнетизму. Намагниченность такой неупорядоченной системы должна вычисляться с учетом разброса локальных полей H_3 путем прямого обобщения уравнения $I/\mu N_\mu = \text{th}(\mu H_0/kT)$, относящегося к регулярной системе:

$$\frac{I}{\mu N_\mu} = \int_{-\infty}^{\infty} \text{th}\left(\frac{\mu H}{kT}\right) F_x(j; H) dH, \quad (11)$$

или

$$j = \int_{-\infty}^{\infty} \text{th}\left(\frac{H/h_J}{\Theta}\right) F_x(j; H) dH, \quad (12)$$

где $H = (4\pi/3)I + H_d + H_3$ — суммарное поле, состоящее из поля $(4\pi/3)I$ магнитных моментов на поверхности сферы Лоренца, размагничивающего поля $H_d = -\eta I$ (η — размагничивающий фактор) и случайного поля H_3 ; $\Theta = kT/W$ — приведенная температура (равная отношению тепловой энергии к характерной энергии РККИ-взаимодействия).

Используя выражение (9) для функции распределения $F(j; H)$, получаем уравнение, обобщающее стандартное уравнение среднего поля:

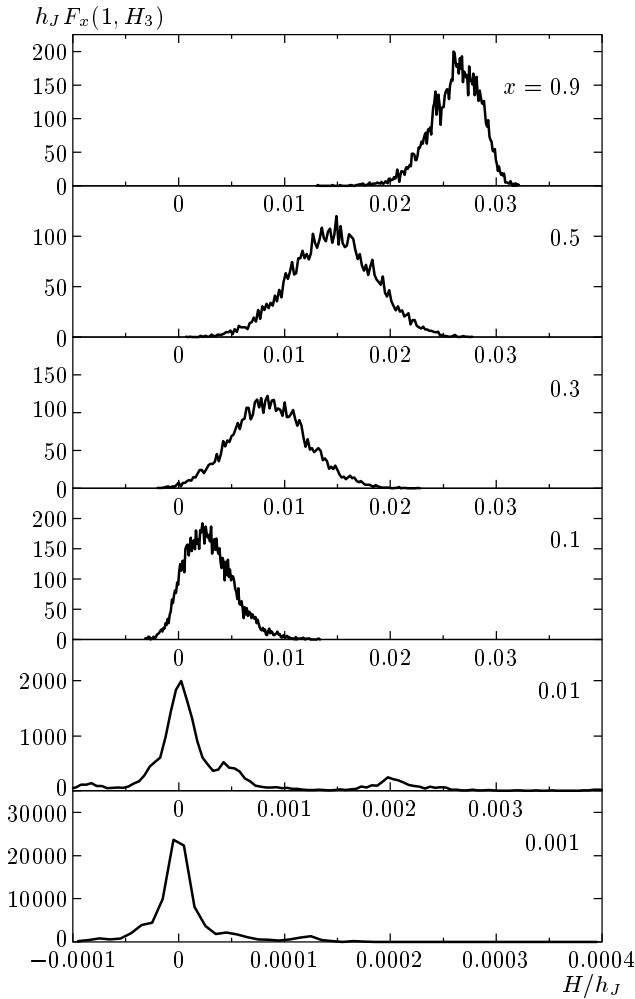


Рис. 4. Эволюция функции распределения $F(1; H_3)$ с изменением концентрации x магнитных ионов, расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла, при $\ell = \infty$. Результаты получены численным моделированием

$$j = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma / h_J} \int_{-\infty}^{\infty} \text{th} \left[\frac{(4\pi/3 - \eta)(x\mu N / h_J)j + u}{\Theta} \right] \times \exp \left[-\frac{(u - jH_j/h_J)^2}{2(\sigma/h_J)^2} \right] du. \quad (13)$$

Этим уравнением определяется фазовая диаграмма системы, температурные зависимости ее намагниченности (в ферромагнитной фазе) и восприимчивости (в парамагнитной фазе), а также зависимость ее температуры Кюри Θ_C от концентрации магнитных ионов.

Для того чтобы выяснить, при каких условиях это уравнение имеет решение, соответствующее маг-

нито-упорядоченному состоянию ($j > 0$), заметим, что при $\Theta \rightarrow 0$ оно приобретает вид

$$j = \Phi(z_0 j), \quad (14)$$

где

$$z_0 = \frac{1}{\sqrt{2} \sigma} \left[H_j + \left(\frac{4\pi}{3} - \eta \right) x\mu N h_J \right],$$

а

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-x^2) dx$$

— интеграл вероятности. Уравнение (14) имеет решение $j > 0$, если $z_0 > \sqrt{\pi}/2$, т. е. при

$$\frac{H_j}{h_J} + \frac{4\pi}{3} \frac{x\mu N}{h_J} > \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\sigma}{h_J} + \eta \frac{x\mu N}{h_J}. \quad (15)$$

Смысл последнего условия в том, что эффективное РККИ-поле H_j и поле $(4\pi/3)x\mu N$, создаваемое магнитными моментами на поверхности сферы Лоренца, вместе должны «пересилить» разброс локальных полей (порядка σ) и размагничивающее поле (пропорциональное η). Наиболее благоприятные условия для возникновения магнитного упорядочения возникают, естественно, при $\eta = 0$ (длинный цилиндрический образец).

Основное состояние будет магнито-упорядоченным при $x > x_c$, где критическая концентрация x_c магнитных ионов определяется уравнением

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\sigma(x_c)}{h_J} - \frac{H_j(x_c)}{h_J} = Z_0 x_c, \quad (16)$$

где

$$Z_0 = \frac{\mu N}{h_J} \left(\frac{4\pi}{3} - \eta \right),$$

в котором параметр Z_0 зависит от магнитного момента примеси и интенсивности РККИ-взаимодействия. Используя функциональные зависимости $\sigma(x)$, $H_j(x)$, найденные выше с помощью численного моделирования (см. рис. 2), можно найти зависимость $x_c(Z_0)$ для одновалентного металла с гранецентрированной кубической решеткой, представленную на рис. 5 (точки).

Для сферического образца ($\eta = 4\pi/3$) критическая концентрация равна $x_c = 0.10$ независимо от величины параметра Z_0 .

Для образца в виде вытянутого эллипсоида ($\eta < 4\pi/3$) критическая концентрация магнитных примесей быстро убывает с ростом этого параметра. При $\eta = 0$ (длинный цилиндр) для типичных значений $W \sim 0.01$ эВ, $\mu \approx 5\mu_B$ находим $Z_0 \sim 0.05$,

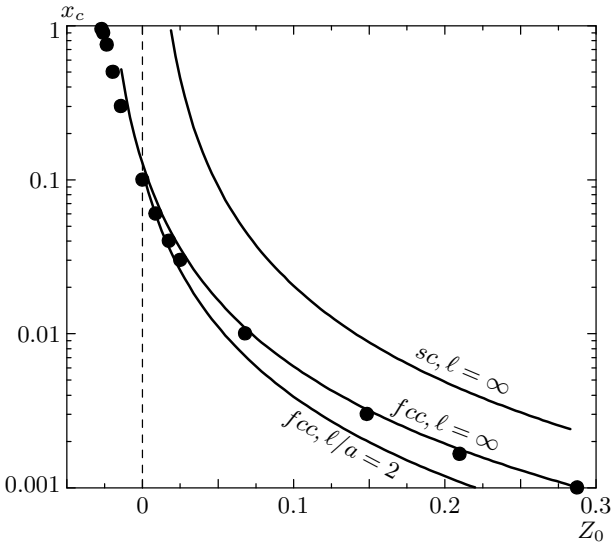


Рис. 5. Зависимость критической концентрации x_c магнитных ионов, расположенных в узлах кубической решетки одновалентного металла, от величины параметра Z_0 . Точки — численный расчет, кривые — аналитическое приближение малых q . Форма образца: $Z_0 > 0$ — вытянутый эллипсоид, $Z_0 < 0$ — сплюснутый эллипсоид, $Z_0 = 0$ — сфера

чему соответствует $x_c \sim 0.01$. Интересно также, что в этом случае величина критической концентрации в «плохом» металле ($l/a = 2$) меньше, чем в «хорошем» (см. рис. 5).

Для образца в виде сплюснутого эллипсоида ($\eta > 4\pi/3$) критическая концентрация магнитных примесей увеличивается с ростом абсолютной величины параметра Z_0 и при $Z_0 \approx -0.025$ достигает значения $x_c = 1$. Фактически это означает отсутствие магнитного упорядочения в реальных условиях.

Ту же зависимость $x_c(Z_0)$ можно найти исходя из аналитических выражений (10) для параметров σ, H_j :

$$x_c = \frac{\phi_P(2k_F r_{min})}{4[(\phi_S(2k_F r_{min})/\pi + Z_0)^2]} \quad (17)$$

Из рис. 5, где этой зависимости соответствует средняя кривая, видно, что она довольно хорошо определяет критическую концентрацию x_c при $Z_0 > 0$, чего, впрочем, и следовало ожидать, поскольку приближение малых q в этом диапазоне является достаточно точным (см. выше).

Там же приведена аналогичная расчетная зависимость для металла с простой кубической решеткой, для которого критическая концентрация оказывается гораздо более высокой.

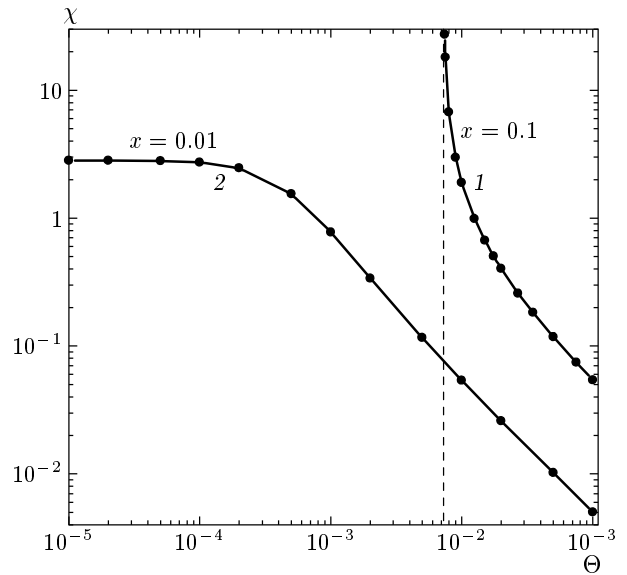


Рис. 6. Температурные зависимости магнитной восприимчивости χ системы магнитных ионов с концентрациями $x > x_c$ (кривая 1) и $x < x_c$ (кривая 2), расположенных в узлах гранцентрированной кубической решетки одновалентного металла ($Z_0 = 0.05, l = \infty$)

Уравнение (14) определяет и низкотемпературную намагниченность $j_0 \equiv j(T \rightarrow 0)$ системы, которая, естественно, отлична от нуля только при $x > x_c$. Концентрационная зависимость $j_0(x)$, приведенная на рис. 6, показывает, что всегда $j_0 < 1$, но уже при небольшом превышении концентрацией x примесей порогового значения x_c равновесная намагниченность j_0 системы приближается к единице. Таким образом, формально система является ненасыщенным ферромагнетиком. Фактически же, эта фаза со случайными направлениями и фрустрацией магнитных моментов примесей представляет собой магнитное (спиновое) стекло⁴.

В области малых концентраций ($x < x_c$) или достаточно высоких температур система парамагнитна. Для описания ее свойств во внешнем магнитном поле H_e достаточно в аргументе функции th в уравнении (13) провести замену $H_3 \rightarrow H_3 + H_e$. В слабом

⁴ Равенство нулю спонтанной намагниченности есть обычно принимаемое, но не обязательное свойство спин-стеклового состояния. Так, состояние с ненулевой намагниченностью возможно в системах с ненулевым средним значением случайного обменного интеграла [14]. Аналогом последнего является в нашем случае случайное РККИ-поле, функция распределения которого такова, что его среднее значение (равное jH_j) отлично от нуля.

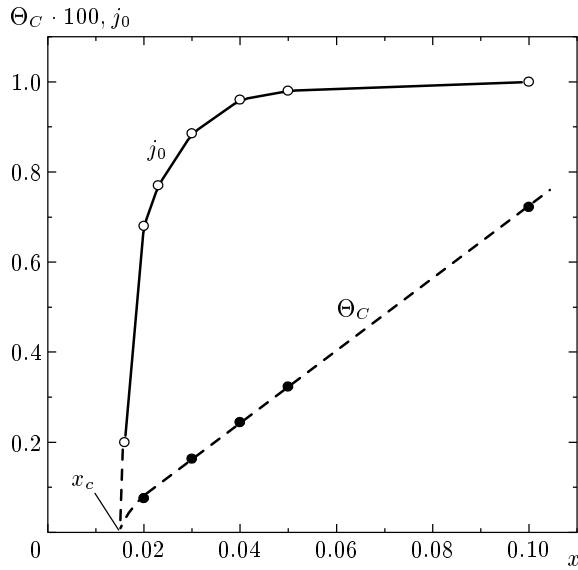


Рис. 7. Концентрационные зависимости низкотемпературной намагниченности j_0 и температуры Кюри Θ_C для системы магнитных ионов, расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла ($Z_0 = 0.05$, $\ell = \infty$)

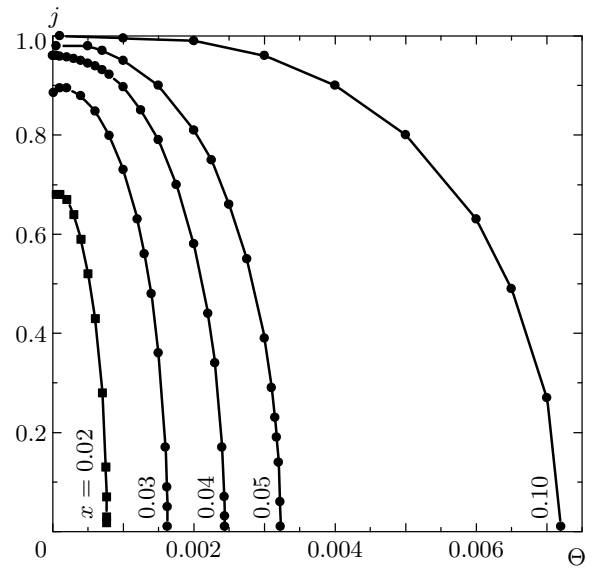


Рис. 8. Температурные зависимости намагниченности j системы магнитных ионов с различной концентрацией $x > x_c$, расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла ($Z_0 = 0.05$, $\ell = \infty$)

внешнем поле ($H_e/h_J \ll 1$) намагниченность парамагнитной системы мала ($j \ll 1$) и после разложения функций, входящих в (13), по H_e и j находим

$$j = \frac{(H_e/h_J)I_0}{1 - (Z_0x + H_j/h_J)I_0}, \quad (18)$$

$$I_0(x, \Theta) = \frac{1}{\Theta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-u^2/2)}{\text{ch}^2[(\sigma/h_J\theta)u]} du.$$

Соотношение (18) позволяет найти низкополевую магнитную восприимчивость системы,

$$\chi = \frac{I}{H_e} = \frac{jZ_0x}{H_e/h_J},$$

и ее температурную зависимость (см. рис. 6), а также температуру Кюри и ее концентрационную зависимость (см. рис. 7).

При низких температурах ($\Theta \ll \sigma/h_J$) имеем $I_0 = \sqrt{2/\pi} h_J/\sigma$, что дает $\chi_0 \equiv \chi(\Theta \ll 1) = x/(x_c - x)$, т.е. не зависящую от температуры восприимчивость. Вблизи ферромагнитного перехода (граница которого определяется условием (16)) она неограниченно возрастает.

При высоких температурах ($\Theta \gg \sigma/h_J$) имеем $I_0 \rightarrow 1/\Theta$ и из (18) следует $\chi(\Theta \gg 1) = 1/\theta$, или

$I = x\mu N\mu H_e/kT$ — обычный закон Кюри для не взаимодействующих изинговских диполей с магнитным моментом μ .

Обращение знаменателя выражения (18) в нуль соответствует переходу в ферромагнитное состояние. Соответствующее условие

$$I_0(Z_0x + H_j/h_J) = 1 \quad (19)$$

при $T = 0$ совпадает с уравнением (16), определяющим критическую концентрацию x_c магнитных примесей, а при $x > x_c$ позволяет определить температуру Кюри Θ_C . Зависимость $\Theta_C(x > x_c)$ от концентрации примесей приведена выше на рис. 6. Характерная величина $\Theta_C \approx 5 \cdot 10^{-3}$ соответствует (при $W \sim 0.01$ эВ) реальной температуре $T_C \approx 0.5$ К.

Температурная зависимость намагниченности системы при температурах $\Theta \leq \Theta_C$ определяется уравнением (13). Серия подобных зависимостей при разных концентрациях примесей $x > x_c$ представлена на рис. 8.

В рамках использованной выше обобщенной теории среднего поля может быть найдена не только намагниченность, но и любая величина, зависящая от магнитного поля. Вычислим, например, магнитную часть C_m теплоемкости рассматриваемой системы, которая для не взаимодействующих изинговских

магнитных моментов в однородном магнитном поле H записывается, как известно, следующим образом:

$$C_m = kNx \left[\frac{\mu H/kT}{\text{ch}(\mu H/kT)} \right]^2. \quad (20)$$

Это соотношение предсказывает линейную концентрационную зависимость $C_m \propto x$, нарушение которой (в эксперименте) свидетельствовало бы о неправомочности такой простой модели и необходимости учета взаимодействия магнитных моментов.

Обобщая это соотношение для случайных локальных полей, описываемых функцией распределения (9), по аналогии с (13) получаем

$$C_m(x, \Theta) = kNI_1, \quad (21)$$

$$I_1(x, \Theta) = \frac{x}{\sqrt{2\pi} \sigma/h_J} \times \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{(Z_0 x j + u)/\Theta}{\text{ch}[(Z_0 x j + u)/\Theta]} \right\}^2 \exp \left[-\frac{(u - jH_j/h_J)^2}{2(\sigma/h_J)^2} \right] du,$$

$j = j(x, \Theta)$ — определенная выше равновесная намагниченность системы, $\sigma(x)$ и $H_j(x)$ — параметры распределения (9).

Из (21) следует, что в результате взаимодействия магнитных моментов теплоемкость не пропорциональна концентрации примесей даже в парамагнитном состоянии ($j = 0$). Действительно, в этом случае из (21) следует

$$I_1 = x \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Theta}{\sigma/h_J} I_2,$$

где

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{z^2}{\text{ch}^2(z)} \exp \left[-\frac{\Theta^2 z}{2(\sigma/h_J)^2} \right] dz.$$

При достаточно высокой температуре, когда $\Theta^2/2(\sigma/h_J)^2 \gtrsim 1$, имеем $I_2 \approx \sqrt{\pi/2}(\sigma/\Theta h_J)^3$ и, следовательно,

$$C_m(x, \Theta > \Theta_C) \approx kNx \left(\frac{\sigma/h_J}{\Theta} \right)^2. \quad (22)$$

Учитывая, что $\sigma/h_J \propto \sqrt{x}$ (см. (10)), получаем $C_m \propto x^2/\Theta^2$. Такая квадратичная концентрационная зависимость магнитной части теплоемкости неоднократно наблюдалась в металлах с магнитными примесями (см., например, результаты работ [15, 16] соответственно для сплавов Cu(Co) и Au(Co)). Однако, как показывают численные расчеты (см. рис. 2), зависимость $\sigma(x) \propto \sqrt{x}$ характерна

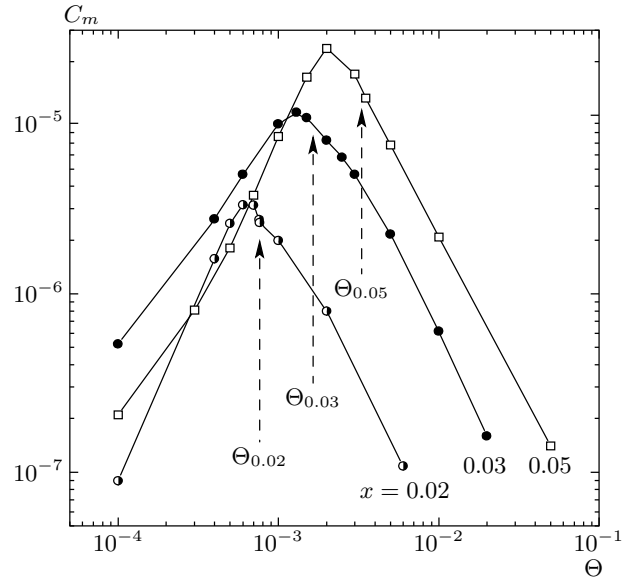


Рис. 9. Температурные зависимости магнитной части теплоемкости $C_m(\Theta, x)$ системы магнитных ионов различной концентрации x , расположенных в узлах гранецентрированной кубической решетки одновалентного металла ($Z_0 = 0.05, \ell = \infty$). Стрелками указаны соответствующие значения температуры Кюри

лишь для сравнительно малых концентраций примесей $x \lesssim 0.1$, а затем становится более «плоской», что должно приводить к замедлению роста теплоемкости с увеличением концентрации. Именно такая тенденция наблюдалась в экспериментах [15]. Отметим также, что, согласно (22), $C_m \propto 1/T^2$ в парамагнитной области. К сожалению, точность соответствующих измерений слишком низка, для того чтобы проверить правильность этой зависимости⁵⁾.

Для определения концентрационной и температурной зависимостей теплоемкости C_m в области низких температур заметим, что

$$I_1 = x \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Theta}{\sigma/h_J} I_3,$$

где

⁵⁾ Низкая точность измерений связана с тем, что магнитная часть теплоемкости мала по сравнению с полной теплоемкостью металла (см. обсуждение в [17] и приведенные там ссылки).

$$I_3 = \frac{1}{\Theta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{z}{\text{ch}(z/\Theta)} \right]^2 \times \\ \times \exp \left[-\frac{(z - jZ_0x - jH_J/h_J)^2}{2(\sigma/h_J)^2} \right] dz.$$

При $\Theta \lesssim \sigma/h_J$ имеем

$$I_3 \approx \frac{\pi^2}{6} \Theta \exp \left[-\frac{j^2(Z_0x + H_J/h_J)^2}{2(\sigma/h_J)^2} \right],$$

что с учетом зависимостей (10) дает

$$I_3 \approx \frac{\pi^2}{6} \Theta \exp \left[-\frac{xj^2(Z_0 + |\phi_S|/\pi)^2}{\phi_P/\pi} \right].$$

При обычных концентрациях примесей $x \ll 1$ и типичных значениях Z_0 , ϕ_S и ϕ_P (см. таблицу) показатель последней экспоненты сравним с единицей, т. е. I_3 зависит от x . Таким образом, в области низких температур магнитная часть теплоемкости не является монотонной функцией концентрации примесей. Это объясняет неоднозначность заключений о наличии или отсутствии такой зависимости [17]. Полученные выводы иллюстрируются найденными с помощью выражений (21) и приведенными на рис. 9 температурными зависимостями $C_m(T, x)$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описание неупорядоченных систем с РККИ-взаимодействием (например, немагнитных металлов, разбавленных магнитными примесями) требует обобщения теории среднего поля, учитывающего неэквивалентность отдельных магнитных моментов в такой системе. В работе рассмотрен вариант такой теории, основанный на расчете и анализе функций распределения случайных магнитных полей, создаваемых нерегулярно распределенными в пространстве магнитными моментами. Эти функции распределения найдены двумя способами: аналитически и численно — путем статистической обработки результатов вычисления случайных полей в модельной системе. Первый метод позволяет найти лишь приближенные аналитические выражения для функций распределения в ограниченном диапазоне концентраций примесей, что, однако, позволяет делать вполне надежные качественные суждения о виде этих функций, а значит, и свойствах изучаемой системы.

В рамках обобщенной теории среднего поля показано, что если концентрация магнитной примеси превышает некоторую критическую величину,

зависящую от типа решетки металла и формы образца, то основное состояние системы становится магнитно-упорядоченным. Найдена магнитная фазовая диаграмма системы, а также температурная зависимость ее магнитной восприимчивости, концентрационная зависимость температуры Кюри, температурная и концентрационная зависимости намагниченности и магнитной части теплоемкости системы. Все они качественно согласуются с экспериментом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 03-02-17029).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Вонсовский, *Теория магнетизма*, Наука, Москва (1971).
2. Н. Ohno, J. Magn. Magn. Mat. **200**, 110 (1999).
3. T. Dietl, A. Haury, and Y. Merle d'Aubigné, Phys. Rev. B **55**, R3347 (1997).
4. Е. З. Мейлихов, Письма в ЖЭТФ **77**, 675 (2003).
5. Е. З. Мейлихов, ЖЭТФ **124**, 650 (2003).
6. К. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
7. M. W. Klein and R. Brout, Phys. Rev. **132**, 2412 (1963).
8. M. W. Klein, Phys. Rev. **173**, 552 (1968); **188**, 933 (1969).
9. В. И. Белоконь, К. В. Нефедев, ЖЭТФ **120**, 156 (2001); ФТТ **44**, 1632 (2002).
10. A. Pilipovicz and H. Claus, Phys. Rev. B **36**, 773 (1987).
11. G. Griffith, F. A. Volkening, and H. Claus, J. Appl. Phys. **57**, 3392 (1985).
12. J. Crangle and W. R. Scott, Phys. Rev. Lett. **12**, 126 (1964).
13. S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943)
14. С. Л. Гинзбург, *Необратимые явления в спиновых стеклах*, Наука, Москва (1989).
15. L. T. Crane and J. E. Zimmerman, Phys. Rev. **123**, 113 (1961).
16. L. T. Crane, Phys. Rev. **125**, 1902 (1962).
17. D. L. Martin, Phys. Rev. B **36**, 2147 (1987).