

05

## Метод оценки температурной зависимости энергии $s$ - $d$ -обменного взаимодействия 3- $d$ -ферромагнетиков

© Ж.Х. Мурлиева, Д.К. Палчаев, М.Э. Исхаков, Ф.А. Акаев

Дагестанский государственный университет, Махачкала

E-mail: dairpalchaev@mail.ru

В окончательной редакции 15 мая 2008 г.

Приведены простые эмпирические выражения, описывающие температурные зависимости энергии  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия и спонтанной намагниченности 3- $d$ -ферромагнетиков, полученные на основе корреляционного анализа экспериментальных данных. Они могут быть использованы, в частности, для оценок температурных зависимостей соответствующих характеристик наноразмерных частиц и пленок ферромагнитных материалов по данным термической деформации.

PACS: 75.50.Gg, 75.90.+w

Наличие самопроизвольной намагниченности в ферромагнитных металлах снимает вырождение в системе электронов проводимости по направлению их спинов. Количественно этот эффект учитывается некоторым энергетическим параметром, описывающим обменное взаимодействие между  $s$ - и  $d$ -электронами. Это взаимодействие имеет существенное значение при формировании свойств ферромагнитных металлов [1]. В частности, на температурной зависимости электросопротивления в ферромагнитной фазе наблюдается аномалия, связанная с магнитным упорядочением. Общее электросопротивление ниже температуры Кюри  $T_C$  складывается из акустической и магнитной составляющих, обусловленных электрон-фононным и спин-электронным рассеянием [2].

Используя модельный  $s$ - $d$ -обменный гамильтониан [3] для металлических ферромагнетиков, Юдин [4] получил выражение для магнитной составляющей электросопротивления никеля:

$$\rho_m = \frac{3\pi m_e V_0 s |D_0|^2}{8e^2 \varepsilon_F \hbar} (1 - \eta^2), \quad (1)$$

где  $V_0$  — объем элементарной ячейки,  $e, s$  — заряд и спин-электрон соответственно,  $D_0$  — парамагнитная энергия  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия,  $\eta$  — относительная спонтанная намагниченность,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми. При этом для упрощения расчетов было принято допущение о постоянстве  $D_0$ , хотя, согласно [5], в изолированном атоме никеля она составляет  $\sim 0.4$  eV, а в кристалле, вследствие увеличивающегося перекрытия волновых функций  $s$ - и  $d$ -электронов, возрастает примерно в три раза. Из физических соображений следует, что с ростом температуры эта энергия в кристалле должна монотонно снижаться.

Температурную зависимость  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия  $D(T)$  можно получить из (1), если корректно выделить магнитную составляющую электросопротивления. Обычно [2,6] для этого из общего  $\rho$  в ферромагнитной фазе вычитается фононная составляющая  $\rho_{ph}$ , рассчитанная по формуле Блоха–Грюнайзена. Здесь возникают две проблемы: во-первых, нелинейность зависимости  $\rho(T)$  во всем интервале выше  $T_C$  приводит к неоднозначности экстраполяции к 0 К; во-вторых, при таком разделении не учитывается взаимодействие магнитной подсистемы с решеткой. В результате такой оценки  $\rho_m$  ход зависимости  $D(T)$  оказывается обратным ожидаемому из теоретических предсказаний [2,5].

Нами [7] предложен новый способ разделения вкладов  $\rho_{ph}$  и  $\rho_m$ , согласно которому магнитный вклад в электросопротивление представляется формулой

$$\rho_m = \rho_m^* \beta T, \quad (2)$$

где  $\beta T = (dV/dT)_P (T/V)$  — объемный коэффициент теплового расширения при постоянном давлении  $P$ ,  $\rho_m^* = 4.2 \cdot 10^{-19} \nu_m$  — характеристическое магнитное электросопротивление, здесь  $\nu_m$  — частота обменного взаимодействия ( $k_B T_C / h$ ). Он был основан на анализе экспериментальных данных по электросопротивлению и коэффициенту теплового расширения никеля.

Исследования  $\rho$  и коэффициента теплового расширения армко-железа в интервале температур  $300 \div 1100$  К, так же как и для никеля [7], нами проводились на одном и том же образце, в одних и тех же условиях. Корреляционный анализ наших данных по  $\rho$  и  $\beta$  армко-железа приводит к следующей линейной зависимости в ферромагнитной фазе:

$$\rho = -6.05 \cdot 10^{-8} + 1.2 \cdot 10^{-5} \cdot \beta T, \quad r = 0.997 \quad (300 \div 900 \text{ К}). \quad (3)$$

Здесь первое слагаемое — значение, экстраполированное в 0 К,  $r$  — коэффициент корреляции, а угловой коэффициент при термодинамическом комплексе  $\beta T$  представляет характеристическое электросопротивление, обусловленное рассеянием на фонах и магнонах,  $\rho_{mph}^*$ :

$$\rho_{mph}^* = \rho_m^* + \rho_{ph}^* = 4.2 \cdot 10^{-19}(\nu_m + \nu_D), \quad (4)$$

где  $\nu_D$  — частота Дебая. Экспериментальное значение  $\rho_{mph}^*$  для армо-железа отличается от рассчитанного по (4) для чистого железа ( $1.33 \cdot 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$ ) всего на 11%. Это хорошее согласие, так как суммарная погрешность определения  $\rho$ ,  $\beta$ ,  $T_C$  и  $T_D$  близка к этому значению. Более того, необходимо принять во внимание неизбежность наличия примесей в железе, которые приводят как к повышению, так и к снижению значений электросопротивления, например в армо-железе. Возможно поэтому для него  $\rho_{mph}^* = 1.2 \cdot 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$ , а для образцов железа чистотой 99.9%  $\rho_{mph}^* = 1.5 \cdot 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$  [7].

По значениям  $\rho_m$ , выделенным таким образом, была установлена температурная зависимость энергии  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия 3- $d$ -ферромагнетиков, для чего выражение (1) представлялось в виде

$$D(T) = k \sqrt{\frac{\rho_m}{1 - \eta^2}}. \quad (5)$$

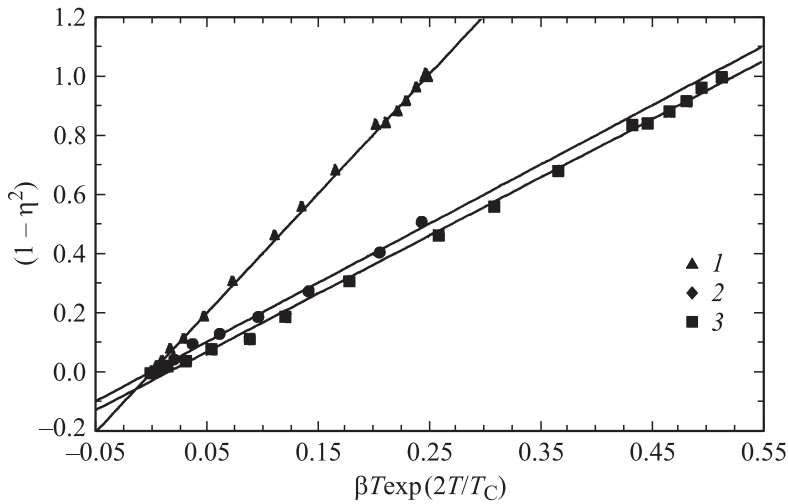
Константа  $k$  в (5) выражается через соответствующие микроскопические характеристики:

$$\text{const} = k = \frac{3\pi m_e V_0 s}{8e^2 \epsilon_F \hbar}. \quad (6)$$

Значения  $D(T)$  для никеля, рассчитанные по (5), хорошо аппроксимируются экспоненциальной зависимостью [8]

$$D = D_0 \exp(-T/T_C) \quad (7)$$

и согласуются с оценками Зинера [7] в пределах высоких и низких температур. В точке Кюри значение  $D(T_C) = k \sqrt{\rho_m^* \beta_C T_C} \approx 0.9 \text{ eV}$ , что примерно в 3 раза выше, чем для уединенного атома никеля, как и предсказывалось в [5]. Этот результат согласуется [2] с фактом экспоненциального уменьшения обменного интеграла при удалении атомов друг от друга, а также с тем, что наиболее сильное изменение



Зависимость  $(1 - \eta^2) - \beta T \exp(2T/T_c)$ : 1 — никель, 2 — железо, 3 — кобальт.

энергии  $s$ - $d$ -взаимодействия происходит ниже  $T_c$ . Все это подчеркивает существенность низкотемпературных процессов спин-электронной релаксации, на которые указывал Е.А. Туров [9].

Для выявления температурного хода энергии  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия для железа и кобальта формулу (1), с учетом эмпирически полученных выражений (2) и (5), мы представили в виде

$$\rho_m = \rho_m^* \beta T = k D_0^2 e^{-2T/T_c} (1 - \eta^2). \quad (8)$$

Зависимости  $(1 - \eta^2)$  от  $\beta T \exp(2T/T_c)$  для Ni, Fe и Co (см. рисунок) оказались линейными, что еще раз подтвердило экспоненциальный характер функции  $D = f(T)$  для всех 3- $d$ -металлов и дало возможность рассчитать значения  $D_0$ .

Для железа эта зависимость приведена до  $\sim 900$  К, поскольку в нем переход из ферро- в парамагнитное состояние ( $\sim 1040$  К) предшествует структурному фазовому переходу (ОЦК  $\leftrightarrow$  ГЦК при 1184 К). Переход от менее плотной к более плотной упаковке происходит с образованием дефектов по Френкелю, которые приводят к снижению теплового расширения и возрастанию сопротивления, т.е. электросопротивление

Значения энергий  $s$ - $d$ -обменного взаимодействия и молекулярного поля для металлов группы железа, а также исходные данные для их расчета

Металл	$\varepsilon_F, 10^{-18} \text{ J}$	$V_0, 10^{-29} \text{ m}^3$	$T_C, \text{ K}$	$D_0, \text{ eV}$	$D_0, 10^{-19} \text{ J}$	$A, 10^{-21} \text{ J}$
Fe	1.769	1.178	1040	4.51	7.220	7.176
Co	1.86	1.140	1400	5.35	8.56	9.66
Ni	1.86	1.090	630	2.61	4.18	4.34

растет не только из-за термической деформации. Очевидно, что при этих температурах корреляция будет неоднозначной.

Значения  $D_0$  для Fe, Co и Ni, оцененные по  $\rho_m^*$  и углу наклона этих прямых, приведены в таблице. Обращает на себя внимание тот факт, что энергия  $s$ - $d$ -взаимодействия примерно на два порядка (см. таблицу) превышает энергию  $A$  (обменный интеграл), оцениваемую по формуле [2]:

$$A = k_B T_C / 2. \quad (9)$$

В работе [2] энергия  $A$  представляется как неизвестная пока по своей природе, отнесенная к одному электрону, энергия молекулярного поля. Значения  $D_0$  порядка энергии Ферми, поскольку с  $d$ -электронами в ионах взаимодействуют  $s$ -электроны с энергиями, близкими к  $\varepsilon_F$ , тогда как взаимодействие между  $d$ -электронами осуществляется через все обобществленные электроны.

Термическая деформация в значительной мере определяет формирование магнитных характеристик конденсированных сред. В частности, на основе корреляционного анализа нами установлено [10], что для Fe, Co, Ni в области температур  $0 \text{ K} < T < T_C/10$  спонтанная намагниченность  $\sigma$  с термической деформацией связана как  $\sigma = \sigma_0 - \sigma^*(\chi)^{3/8}$ , что согласуется с законом Блоха ( $\sigma \sim T^{3/2}$ ), а в области от  $T_C/5$  до  $T_C$  как  $\sigma = \sigma_0 - \sigma^*(\chi)^{8/3}$ . Соответствующее интерполяционное выражение имеет вид

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma^*(\chi)^{8/3} + \sigma^*[(\chi)^{3/8} - (\chi)^{8/3}](T - T_C)/T_C, \quad (10)$$

где  $\sigma_0$  — спонтанная намагниченность при 0 K;  $\chi = (\beta T / \beta_C T_C)$  — отношение комплекса  $\beta T$  при некоторой температуре  $T$  к его значению при  $T_C$ ;  $\sigma^* = 2\mu_B$ .

В работе [11] отмечается, что магнитное упорядочение в 3-*d*-металлах исчезает лишь при размерах частиц  $\leq 1$  nm. Причем температурная зависимость магнитных свойств наночастиц отличается от таковой для объемных ферромагнетиков. Наблюдается также зависимость магнитного упорядочения от размера наночастиц при высоких температурах. Поэтому знание температурной зависимости энергии *s-d*-обменного взаимодействия имеет практическое значение для оценок магнитных свойств наноразмерных частиц, пленок ферромагнитных материалов и соединений на их основе по данным термической деформации, получение которых для этих объектов не представляет проблемы.

## Список литературы

- [1] *Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А.* // УФН. 1962. Т. 77. В. 3. С. 377–443.
- [2] *Вонсовский С.В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
- [3] *Вонсовский С.В., Туров Е.А.* // ЖТФ. 1953. Т. 24. С. 419–428.
- [4] *Юдин А.А.* // Вестник Московского университета. 1958. № 4. С. 89–95.
- [5] *Zener C.* // Phys. Rev. 1951. V. 81. P. 440–444.
- [6] *Okaz Ali M., El-Osairy M., Mahmud N.S.* // Ind. J. Phys. 1988. 62A. N 5. P. 500–509.
- [7] *Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Борзов Е.Д.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 48. С. 48–53.
- [8] *Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Казбеков К.К.* и др. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 16. С. 28–35.
- [9] *Туров Е.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1955. Т. 19. № 4. С. 474–480.
- [10] *Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Борзов Е.Д.* и др. // Сб. тр. Междунар. науч. конф. „Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах“. 11–14 сентября 2002, Махачкала. С. 162–165.
- [11] *Фролов Г.И., Бачина О.И., Завьялова М.М.* и др. // ЖТФ. 2008. Т. 78. В. 8. С. 101–106.