

СПИНОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕПЛОЕМОСТИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

© А.А.Повзнер, А.Г.Волков

Уральский государственный технический университет,
620002 Екатеринбург, Россия
(Поступило в Редакцию 5 июня 1995 г.)

1. Причины формирования аномалий электронных физических свойств ферромагнитных переходных металлов вблизи точки Кюри (T_c) до сих пор окончательно не выяснены. В одних работах делаются попытки описания этих особенностей в рамках стонеровской модели, постулирующей существование раздвинутых по шкале энергий электронных зон с разными спиновыми квантовыми числами ($\sigma = \pm 1$) [1], а в других работах наблюдаемые особенности анализируют с помощью теории локальных спиновых флуктуаций (СФ) [2]. Между тем нейтронографические исследования указывают на существование в достаточно широком интервале температур за пределами T_c (и критической области) заметного вклада в рассеяние нейтронов от длинноволновых спиновых флуктуаций (см. [3,4]). Кроме того, анализ возникающих при рассеянии поляризованных нейтронов спиновых переворотов [4] указывает на принципиальную неприменимость к этим металлам стонеровской модели [5]. Вследствие этого в работах [6-8] развивалась теория динамических длинноволновых спиновых флуктуаций, которая, с одной стороны, объясняла данные нейтронографии [4], а с другой стороны, описывала возникающие эффекты расщепления электронных состояний во флуктуирующих в пространстве и во времени обменных полях ($\varepsilon \rightarrow \varepsilon \pm \xi$).

2. В настоящем сообщении развитый подход используется для анализа электронной теплоемкости ферромагнитных переходных металлов, плотность электронных состояний, которых согласно [7], удовлетворяет соотношению

$$g(\varepsilon, \xi) = (1/2) \sum_{\sigma=\pm 1} g(\varepsilon + \sigma\xi) \left[1 + \sigma\sigma' \frac{m_0}{m_L} \left\{ 1 - \frac{\langle m^2 \rangle}{m_L^2} \right\} \right]. \quad (1)$$

Здесь $g(\varepsilon)$ — плотность состояний в приближении среднего поля, $\xi = Qm_L$, Q — параметр межэлектронного взаимодействия, $m_L = (m_0^2 + \langle m^2 \rangle)^{1/2}$ — амплитуда локального магнитного момента, m_0 — намагниченность, $\langle m^2 \rangle$ — локальная амплитуда спиновых флуктуаций, выражаемая в соответствии с флуктуационно-диссипационной теоремой через динамическую магнитную восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega, \xi)$ (\mathbf{q} — квазиимпульс, ω — частота), мнимая часть которой пропорциональна интенсивности рассеяния нейтронов [3].

Вычисляя далее энергию одноэлектронных возбуждений с учетом спин-флуктуационной перенормировки плотности электронных состояний (1) и определяя собственную энергию СФ в соответствии с тем, как это сделано в [3], можно получить электронную теплоемкость в виде

$$C_e(\xi, T) = C_{0e}(\xi, T) + C_{f1}(\xi, T). \quad (2)$$

Здесь одноэлектронная составляющая выражается через температурную производную от энергии электронных возбуждений и оказывается перенормированной флуктуациями

$$C_{0e}(\xi, T) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon + \sigma\xi) \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \mu) \left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{\partial \mu}{\partial T} + \left[\sigma + \frac{\partial \mu}{\partial \xi} \right] \frac{\partial \xi}{\partial T} \right\}, \quad (3)$$

где f_F — функция Ферми-Дирака, μ — химический потенциал. В свою очередь для спин-флуктуационного вклада в теплоемкость находим формулу

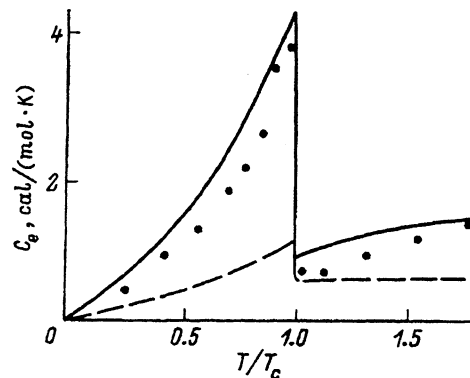
$$C_{f1}(\xi, T) = Q \sum_{\mathbf{q}} D^{-1}(\mathbf{q}, 0, \xi) \frac{d}{dT} \int_0^{\infty} d\omega f_B(\omega/T) \text{Im} D(\mathbf{q}, \omega, \xi), \quad (4)$$

в которой f_B — функция Бозе-Эйнштейна, а перенормированный СФ фактор обменного усиления восприимчивости [6]

$$D(\mathbf{q}, \omega, \xi) = D(0, 0, \xi) + aq^2 + i\omega b/q, \quad (5)$$

причем коэффициенты a и b находятся либо прямыми зонными расчетами, либо из данных магнитной нейтронографии [3].

Найденное выражение для теплоемкости позволяет проанализировать истинную роль СФ и одноэлектронных термических возбуждений в формировании $C_e(T)$. При этом особый интерес представляет конкретный анализ электронной теплоемкости Ni, плотность состояний которого $g(\varepsilon)$ обладает тонкой структурой, усиливающей (по сравнению с другими металлами группы железа) вклад от одноэлектронных стонеровских возбуждений (см. [1]).



Температурная зависимость электронной теплоемкости никеля.

Сплошная линия — результат расчета, штриховая — вклад от одноэлектронных термических возбуждений. Точки — результат обработки экспериментальных данных [1].

3. Для анализа $C_e(T)$ ферромагнитного никеля использовались те же параметры магнитного состояния (см. [3,9]) и кривая $g(\varepsilon)$ [10], что и ранее в [8]. При этом аналогично [8] полагалось, что в рассматриваемом случае длинноволновых СФ $\langle m^2 \rangle = (T/T_0)^{4/3}$, где $T_0 = 7200$ К, а $Q = 0.8$ эВ. Результаты проведенных по формулам (3)–(5) расчетов представлены на рисунке. Из них следует, что расщепление электронного спектра длинноволновыми флуктуациями подавляет вклад $C_{0e}(\xi, T)$ (ср. с данными [1]) и усиливает чисто флуктуационную составляющую теплоемкости, аномальное изменение которой вблизи T_c обусловлено фактором усиления магнитной восприимчивости $D(\xi, T)$. Выше T_c и за пределами аномального максимума теплоемкости также наблюдается сравнительно сильный рост $C_e(T)$, который связан с увеличением числа парамагнетиков и ранее не находил теоретического объяснения (см. [1,3]).

Таким образом, при последовательном учете влияния на электронную структуру СФ можно не только описать экспериментальные данные о неупругом рассеянии нейтронов, но и понять основные механизмы формирования аномалий температурной зависимости электронной теплоемкости. Мы считаем, что дальнейшее развитие использованной здесь модели расщепления электронных спектров ферромагнитных металлов динамическими длинноволновыми СФ будет полезным и для выработки адекватных представлений об аномалиях других физических свойств рассматриваемых веществ.

Список литературы

- [1] Розенфельд Е.В., Сивинцев А.А., Ирхин Ю.П. ФТТ **33**, 1, 202 (1991).
- [2] Гребенников В.И. ФММ **66**, 2, 227 (1988).
- [3] Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М. (1988). 287 с.
- [4] Lowde R.D., Moon R.M., Pagonis B., Perry C.H., Sokoloff J.B., Vaghan-Watkins R.S., Wiltshire M.C.K., Crangle J. J. Phys. F **13**, 1, 249 (1983).
- [5] Sokoloff J.B. J. Phys. F **5**, 10, 1946 (1975).
- [6] Повзнер А.А. ФНТ **19**, 11, 1282 (1993).
- [7] Повзнер А.А. ФНТ **35**, 11, 3159 (1993).
- [8] Гельд П.В., Повзнер А.А., Волков А.Г. ДАН **333**, 3, 321 (1993).
- [9] Crangle J., Goodman G.M. Proc. Roy. Soc. A **321**, 2, 477 (1971).
- [10] Wakoh S. J. Phys. Soc. Jap. **30**, 4, 1068 (1971).
- [11] Brown M., Kohlaas R., Vollmer O. Z. Angew. Phys. **25**, 6, 365 (1968).