УДК 538.115

ВОЛНА СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В УПОРЯДОЧЕННЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВАХ МАРГАНЦА С МЕТАЛЛАМИ VII И VIII ГРУПП

Е. Е. Слядников, В. В. Тугушев

Исследуется класс веществ $Mn_{1+x}Me_{1-x}$ (Me=Ni, Pd, Pt, Rh, Ir) исходя из модели волны спиновой плотности (ВСП) с особенностями, характерными для систем данного типа. Построены качественные зависимости температур Нееля и Кюри от содержания марганца в сплаве, вычислена магнитная восприимчивость системы.

Известно, что в ряде сплавов и соединений переходных и редкоземельных металлов антиферромагнитное (АФМ) упорядочение удачно описывается в рамках представлений о волне спиновой плотности (ВСП). Тенденция к антиферромагнетизму в этих системах связывается со специфической топологией поверхности Ферми — «нестингом» электронных и дырочных ее участков в некоторой области квазиимпульсов. Модель ВСП позволила объяснить многие особенности магнитных свойств хрома и его разбавленных сплавов (см., например, обзор [1]), квазиодномерных проводников — солей Бечгаарда [2], геликоидальных магнетиков — сплавов иттрия с тяжелыми редкоземельными металлами [3], упорядоченных сплавов типа FeRh, Pt_3Fe [3]. Обсуждается применимость этой модели к металлооксидам и возможная связь ВСП с феноменом высокотемпературной сверхпроводимости [4].

В настоящей работе исследуется класс веществ — бинарных сплавов марганца — с формулой состава $Mn_{1+x}Me_{1-x}$(Me=Ni, Pd, Pt, Rh, Ir) исходя из модели ВСП с особенностями, характерными для систем данного типа. Во-первых, предполагается, для анализа магнитного упорядочения в рамках зонной теории существенны две группы электронных состояний: 1) состояния конгруэнтных (особых) участков поверхности Ферми, доля которых $N(0)$ в полной плотности состояний N_Σ невелика, но которые ответственны за формирование ВСП; 2) электронные состояния «резервуара» с большой плотностью и сильно развитыми локальными спиновыми флуктуациями, которые в нашем случае будем описывать как подсистему локальных спинов, связанных прямым эффективным ферромагнитным (ФМ) взаимодействием [5]. Во-вторых, необходим учет косвенного АФМ взаимодействия спиновых флуктуаций через состояния магнитных участков, включающего как обычный РККИ-обмен через свободные носители, так и обмен через электрон-дырочные пары, формирующие ВСП (триплетный конденсат) [6].

Экспериментально установлено, что ниже температуры Нееля сплавы $Mn_{1+x}Me_{1-x}$, близкие по составу к эквиатомному ($x \ll 1$), имеют простую удвоенную АФМ структуру, состоящую из слоев с противоположной ориентацией спиновой плотности с максимумами на узлах Mn и нулями на узлах Me [7-9]. Нейтронографические измерения, проведенные в АФМ фазе, показали наличие сильно локализованной спиновой плотности ($\sim 4\ \mu_B$) на узлах марганца и очень малую величину спиновой плотности ($\sim 0.1\ \mu_B$) на узлах Me [8-10]. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе подчиняется закону Кюри—Вейса для соединений MnNi, MnRh [11, 12] и слабо зависит от температуры в сплавах MnPd, MnPt [11]. В АФМ фазе в области температур от T_N (несколько сотен градусов Кельвина) до температуры жидкого азота восприимчивость сплавов Mn с Ni, Pd, Pt, Rh становится практически независимой от температуры [11, 12], а в сплаве MnIr при низких температурах наблюдается слабый ферромагнетизм [13]. Расчеты зонной структуры MnNi в парамагнитной фазе показывают, что плотность электронных состояний имеет характерную двухпиковую структуру [14]. Уровень Ферми попадает в область высокоэнергетического пика, который формируется в основном состоянии Mn, тогда как низкоэнергетический — состояниями Ni. Поверхность Ферми имеет почти плоские участки, параллельные плоскости ГXM. Поскольку Pd и Pt изоэлектронны Ni, а Rh, Ir — ближайшие соседи Pd и Pt в периодической системе, то можно надеяться, что зонная структура сплавов марганца с этими металлами будет иметь много общих черт с рассчитанной для MnNi.

1. Модельный гамильтониан и основные уравнения

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H_0 + H_1' + H_1'' + H_2, \tag{1}$$

где

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\,\alpha} \mathscr{E}(\mathbf{k})\, a^+_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha} + g \sum_{\substack{\mathbf{k},\,\mathbf{k}',\,\mathbf{q}\\ \alpha,\,\beta}} a^+_{\mathbf{k}\alpha} a^+_{\mathbf{k}'\beta} a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\beta} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\alpha} \tag{2}$$

представляет собой гамильтониан электронов плоских участков; g — эффективный точечный потенциал взаимодействия; α, β — спиновые индексы. Для зоны, формирующей плоские участки поверхности Ферми, можно приближенно записать соотношение $\mathscr{E}(\mathbf{k}) = \xi(k_z) + \mu(\mathbf{k}_\perp)$, $\mathscr{E}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1) = \mathscr{E}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_2) = -\xi(k_z) + \mu(\mathbf{k}_\perp)$, где $\xi(k_z) = v_F k_z$, ось z выбрана вдоль направления XR, $\mu(\mathbf{k}_\perp)$ дает степень гофрированности в поперечном направлении. Величины $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ представляют собой векторы геометрического наложения плоских участков и равны соответственно (110) π/a и (1—10) π/a. Взаимодействие электронов плоских участков с локальными спинами и примесями описывается гамильтонианами H_1' и H_1'' соответственно

$$H_1' = -\sum_{\substack{\mathbf{k},\,\mathbf{k}'\\ \alpha,\,\beta}} \sum_m J(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_m} (\mathbf{S}_m \cdot \sigma_{\alpha\beta})\, a^+_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}'\beta}, \tag{3a}$$

$$H_1'' = -\sum_{\substack{\mathbf{k},\,\mathbf{k}'\\ \alpha,\,\beta}} \Big\{ \sum_m{}' [I(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')(\mathbf{S}_m \cdot \sigma_{\alpha\beta}) - v(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')\,\delta_{\alpha\beta}]\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_m} + \sum_m V(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')\,\delta_{\alpha\beta} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_m} \Big\}\, a^+_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}'\alpha} \tag{3б}$$

где $\sum_m$ выполняется по узлам, занятым атомами Mn, а $\sum_m{}'$ — по узлам подрешетки Me; $\mathbf{S}_m$ — локальный спин на узле $\mathbf{R}_m$; $\mathbf{R}_m$ — радиус-вектор кристаллической решетки; V, v, J, I — матричные элементы прямого и обменного рассеяния электронов плоских участков на подрешетках Mn и Me. Гамильтониан взаимодействия спинов между собой имеет вид

$$H_2 = -\sum_{m,\,m} f(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'})(\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_{m'}). \tag{4}$$

Взаимодействие между электронами плоских участков и взаимодействие спинов будем описывать в приближении среднего поля. В рамках этого приближения задача разбивается на два этапа. С одной стороны, мы должны написать уравнение самосогласования для амплитуды ВСП, в которое входят локальные моменты, а с другой стороны, сама величина локального момента должна вычисляться с учетом подмагничивающего поля ВСП.

Синусоидальную АФМ структуру ВСП удобно описывать с помощью двух параметров порядка

$$\Delta_{\mathbf{q}_{1,2}} = gT \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{Sp}\, \hat{\sigma}_z \hat{G}_{\mathbf{k}\ \mathbf{k}-\mathbf{q}_{1,2}}(\omega_n). \tag{5}$$

Матричные температурные функции Грина, соответствующие выделенному направлению $\mathbf{q}_1$, удовлетворяют уравнениям

$$\begin{gathered}
\hat{G}_{\mathbf{kk}} = \hat{\mathring{G}}_{\mathbf{kk}} - \hat{\mathring{G}}_{\mathbf{kk}} \tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \hat{\sigma}_z \hat{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1\,\mathbf{k}},\\
\hat{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1\,\mathbf{k}} = -\hat{\mathring{G}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1\ \mathbf{k}+\mathbf{q}_1} \tilde{\Delta}_{-\mathbf{q}_1} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_{\mathbf{kk}},\\
\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \hat{\sigma}_z = \Delta_{\mathbf{q}_1} \hat{\sigma}_z + J\,[S(h^+) - S(h^-)]\,\hat{\sigma}_z + \\
+ 2J^2 \mathscr{L}(h) \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{kk}+\mathbf{q}_1} +
\end{gathered} \tag{6}$$

$$+\begin{cases} xI\,[S(h_1^+) - S(h_1^-)]\,\hat{\sigma}_z + x\,[v^2 + I^2 \mathscr{L}(h_1)] \sum\limits_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{k}\ \mathbf{k}+\mathbf{q}_1}, & x > 0,\\ -|x|\,J\,[S(h^+) - S(h^-)]\,\hat{\sigma}_z + 2\,|x|\,[V^2 - J^2 \mathscr{L}(h)] \sum\limits_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{k}\ \mathbf{k}+\mathbf{q}_1}, & x < 0, \end{cases}$$

$$S(h) = {}^1/_2 S B_s\,(h/T),\quad \mathscr{L}(h) = S\,(S+1)\,[\alpha_s(h^+/T) + \alpha_s(h^-/T) - 1],$$

$$\alpha_s(h/T) = 1 - [S\,(S+1)]^{-1/2} B_s(h/T)\,\mathrm{cth}\,(h/2T),\quad x = 2c - 1.$$

Здесь $B_s(h)$ — функция Бриллюэна, c — содержание марганца в сплаве. V, J (v, I) — потенциалы прямого и обменного внутризонного рассеяния электронов плоских участков на узлах подрешетки Mn (Me). Потенциалы межзонного рассеяния равны потенциалам внутризонного рассеяния на подрешетке Mn и много меньше потенциалов внутризонного рассеяния на подрешетке Me. Уравнения на функции Грина, соответствующие направлению $\mathbf{q}_2$, получаются из (6) заменой $\mathbf{q}_1 \to \mathbf{q}_2$.

Уравнения для средней намагниченности подрешетки локальных спинов и средней намагниченности имеют вид

$$L = S\,(h^+) - S\,(h^-) + \begin{cases} x\,[S(h_1^+) - S(h_1^-)], & x > 0,\\ -|x|\,[S(h^+) - S(h^-)], & x < 0, \end{cases} \tag{7}$$

$$M = S\,(h^+) + S\,(h^-) + \begin{cases} x\,[S(h_1^+) + S(h_1^-)], & x > 0,\\ -|x|\,[S(h^+) + S(h^-)], & x < 0, \end{cases} \tag{8}$$

Усредняя гамильтонианы (3)—(4) по электронным переменным, определим эффективные поля

$$\begin{gathered}
h^{\pm} = \pm \frac{JS}{g}\,(\Delta_{q_1} + \Delta_{q_2}) + FS\left(M \mp \frac{1}{3}L\right),\\
h_1^{\pm} = \pm \frac{IS}{g}\,(\Delta_{q_1} - \Delta_{q_2}) + fSM,
\end{gathered} \tag{9}$$

где F, f — потенциалы обменного взаимодействия локального спина Mn соответственно на подрешетке Mn и Me со средним полем локальных спинов. «Нулевые» функции Грина имеют вид

$$\begin{gathered}
\hat{\mathring{G}}_{\mathbf{kk}} = [i\hat{\omega}_n - \xi],\quad \hat{\mathring{G}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1\ \mathbf{k}+\mathbf{q}_1} = [i\hat{\omega}_n + \xi],\\
\hat{\omega}_n = \omega_n - i\,(\mu + J\hat{\sigma}_z\,[S(h^+) - S(h^-)]) + \\
+ 2J^2 S\,(S+1) \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{kk}} +
\end{gathered} \tag{10}$$

$$+\begin{cases} x\left[\left(v^2 + I^2 S\,(S+1)\left(\sum\limits_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{kk}} - iI\hat{\sigma}_z\right) S(h_1^+) + S(h_1^-)\right)\right], & x > 0,\\ |x|\left[2\,(V^2 + J^2 S\,(S+1)) \sum\limits_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{kk}} + iJ\hat{\sigma}_z\,(S(h^+) + S(h^-))\right], & x < 0, \end{cases}$$

$$\omega_n = \pi T\,(2n + 1),\quad n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots.$$

2. Определение температур Нееля и Кюри

Рассмотрим систему при $x \leqslant 0$. Предполагая $T_k \ll T_N$ и ограничиваясь в (5)—(10) членами первого порядка по Δ_{q_1} и Δ_{q_2}, получим уравнение на температуру Нееля

$$\ln \frac{T_N}{\mathring{T}_N} = \mathrm{Re}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\nu - i\mu}{2\pi T_N}\right)\right] + \frac{1}{gN(0)} \frac{\delta}{1+\delta}, \tag{11}$$

$$\nu = 4\pi N(0)\left[|x| V^2 + \frac{1}{3}(1 - |x|) J^2 S(S+1)\right],$$

$$\delta = \frac{1}{3}(1 - |x|)\frac{J^2}{g}\frac{S(S+1)}{T_N + T_A}, \quad T_A = \mathring{T}_A - \frac{1}{9}|x| S(S+1) F,$$

$$\mathring{T}_A = \frac{1}{9} S(S+1) F, \quad \mathring{T}_N = 2W \frac{\pi}{\gamma} e^{-1/gN(0)},$$

где W — характерная частота обрезания, γ — постоянная Эйлера.

Из уравнений (5)—(11) видно, что при температуре T_N возникает распределение спиновой плотности ($\Delta_{q_1} = \Delta_{q_2}$) с пучностями на узлах подрешетки Mn и нулями на узлах подрешетки Me. Локальные спины Mn ориентируются в поле ВСП так, что их проекция на каждом узле соответствует амплитуде появившейся ВСП. ФМ взаимодействие между локальными спинами Mn уменьшает температуру Нееля. Ограничиваясь в (8) членами первого порядка по M, получим уравнение на температуру Кюри

$$1 = (1 - |x|)\frac{FS^2}{T_k} B'_S\left(\frac{JS}{gT_k}[\Delta_{q_1} + \Delta_{q_2}] - \frac{1}{3}\frac{FSL}{T_k}\right), \tag{12}$$

где $B'_S(h)$ — производная от функции Бриллюэна. Предполагая $S\ [J(\Delta_{q_1} + \Delta_{q_2})/g - FL/3]/T_k \gg 1$, из (12) получим уравнение

$$1 = \frac{(1 - |x|)}{T_k} FS^2 A(S) \exp\left\{-\frac{1}{T_k}\left[2\frac{J}{g}\Delta_0 - \frac{1}{3}(1 - |x|) FS\right]\right\}. \tag{13}$$

Здесь $A(S)$ — числовой множитель, Δ_0 — решение уравнения (5) при $T=0$. Из (13) видно, что решение T_k существует только при выполнении условия $(1 - |x|)FS^2A(S)/[2J\Delta_0/g - (1 - |x|)Fs/3] \gg 1$. Очевидно, что при $2J\Delta_0/g \gg (1 - |x|)FS/3$ это условие не выполняется. Таким образом, локальные спины Mn замерзают в поле ВСП и средняя намагниченность равна нулю.

Рассмотрим случай $x > 0$. Предполагая $T_k \sim T^* \ll T_N$ и ограничиваясь в (5)—(10) членами первого порядка по Δ_{q_1} и Δ_{q_2}, получим уравнения на T_N и T^*

$$\ln \frac{T_N}{\mathring{T}_N} = \mathrm{Re}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\nu - i\mu}{2\pi T_N}\right)\right] + \frac{1}{gN(0)} \frac{\delta_0}{1+\delta_0},$$

$$\ln \frac{T^*}{\mathring{T}_N} = \mathrm{Re}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\nu^* - i\mu}{2\pi T^*}\right)\right] + \frac{1}{gN(0)} \frac{\delta^*}{1+\delta^*}, \tag{14}$$

$$\nu = 2\pi N(0)\left[xv^2 + \frac{1}{3} S(S+1)(2J^2 + xI^2)\right],$$

$$\delta_0 = \frac{1}{3}\frac{J^2}{g}\frac{S(S+1)}{T_N + \mathring{T}_A},$$

$$\nu^* = \pi N(0)[xv^2 + S(S+1)(2J^2 + xI^2)],$$

$$\delta^* = \frac{1}{3} x \frac{I^2}{g}\frac{S(S+1)}{T^*}.$$

Из уравнений (5)—(10), (14) следует, что при T_N возникает распределение спиновой плотности с пучностями на узлах подрешетки Mn и нулями на узлах подрешетки Me. При T^* происходит перестройка магнитной структуры ($\Delta_{q_1} \neq \Delta_{q_2}$), после которой пространственное распределение спиновой плотности имеет пучности на узлах подрешетки Mn ($\Delta_{q_1} + \Delta_{q_2}$) и отличное от нуля значение на узлах подрешетки Me $(\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2})$. Ограничиваясь в (8) членами первого порядка по M и предполагая $S\,[J\,(\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2})/g-FL/3]/T_k \gg 1$, $IS\,(\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2})/gT_k \ll 1$, получим уравнение на температуру Кюри

$$1=\frac{S^2}{T_k}\left[FA\,(S)\exp\left\{-\frac{1}{T_k}\left[2\frac{J}{g}\,\Delta_0-\frac{1}{3}\,FS\right]\right\}+xf\,\frac{(S+1)}{3S}\right]. \qquad (15)$$

Уравнение (15) легко решить графическим способом. Из (15) видно, что $T_k \approx xfS\,(S+1)/3$. ФМ взаимодействие локальных спинов Mn между собой стимулирует возникновение средней намагниченности. В области температур от T_N до T^* локальные моменты Mn на подрешетке Mn подмагничиваются в поле ВСП, в то время как моменты Mn на подрешетке Me остаются парамагнитными. При $T_k \sim T^*$ в системе происходит ФМ упорядочение и возникает отличное от нуля значение спиновой плотности на узлах подрешетки Me. Локальные моменты Mn ориентируются в полях ВСП и средней намагниченности так, что их проекция на каждом узле соответствует амплитуде эффективного поля, полученного при сложении этих полей.

3. Магнитная восприимчивость локальных моментов

Магнитную восприимчивость подсистемы локальных моментов удобно условно разделить на восприимчивость подрешетки марганца (χ^{Mn}) и подрешетки Me (χ^{Me})

$$\chi=\chi^{\mathrm{Me}}+\chi^{\mathrm{Mn}}. \qquad (16)$$

Используя (7)—(8), получим выражения, например, для продольной восприимчивости

$$\chi_{\parallel}^{\mathrm{Mn}}=\frac{(1-|x|)\,\mu_B^2S^2B_s'\,((JS/gT)\,[\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2}]-FsL/3T)}{T-(1-|x|)\,S^2FB_s'\,(JS/gT)\,[\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2}]-FSL/3T)},$$

$$\chi_{\parallel}^{\mathrm{Me}}=0,\ x\leqslant 0, \qquad (17)$$

$$\chi_{\parallel}^{\mathrm{Mn}}=\frac{\mu_B^2S^2B_s'\,(JS/gT\,[\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2}]-FSL/3T)}{T-S^2FB_s'\,((JS/gT)\,[\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2}]-FSL/3T)},$$

$$\chi_{\parallel}^{\mathrm{Me}}=\frac{x\mu_B^2S^2B_s'\,((IS/gT)\,[\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2}])}{T-xS^2fB_s'\,((IS/gT)\,[\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2}])},\quad x>0. \qquad (18)$$

Выражения для поперечной восприимчивости легко записать аналогичным образом. Используя (17), исследуем поведение восприимчивости при $x\leqslant 0$. В парамагнитной области $\chi^{\mathrm{Mn}}\,(T)$ подчиняется закону Кюри—Вейса, что связано с существованием локальных моментов на атомах Mn. Ниже T_N $\chi^{\mathrm{Mn}}\,(T)$ слабо зависит от температуры из-за взаимодействия локальных моментов с ВСП. χ^{Me} равна нулю.

Рассмотрим случай $x>0$, $T_k \sim T^* \ll T_N$. Из (18) следует, что $\chi^{\mathrm{Mn}}\,(T)$ совпадает с $\chi^{\mathrm{Mn}}\,(T)$ при $x=0$ (17). $\chi^{\mathrm{Me}}\,(T)$ подчиняется закону Кюри—Вейса и расходится при $T_k=xS^2f/3$.

4. Род антиферромагнитного перехода

Установлено, что упорядоченные бинарные сплавы Mn с Ni, Pd, Pt, Rh, Ir наряду с АФМ переходом при T_N испытывают структурный переход из β-фазы типа CsCl в θ-фазу типа CuAu1 при температуре $T_\theta \leqslant T_N$ [15]. Исследуем влияние структурного перехода на род АФМ перехода. Для этого запишем разложение Ландау для свободной энергии $F\,(\eta,\Delta)$ по структурному параметру порядка η и по АФМ параметру порядка $\Delta=(\Delta_{q_1}+\Delta_{q_2})$ вблизи температуры Нееля

$$F=\alpha\,(T-T_N)\,\Delta^2+\beta\Delta^4+\gamma\Delta^6+\varphi\,(T-T_\theta)\,\eta^2+\varkappa\Delta^2\eta. \qquad (19)$$

Минимизируя F по η, получим

$$F = \alpha(T - T_N)\Delta^2 + \left[\beta - \frac{\varkappa^2}{4\varphi(T - T_\theta)}\right]\Delta^4 + \gamma\Delta^6. \qquad (20)$$

Из уравнения (20) следует, что при $T_\theta \leqslant T_N$ АФМ переход происходит вторым родом, если знак коэффициента при Δ^4 положительный, и первым родом, если знак коэффициента отрицательный.

5. Обсуждение результатов

Хотя предложенная модель АФМ и ФМ упорядочения в сплавах MnMe не претендует на количественное согласие с экспериментом, тем не менее она дает ряд любопытных результатов, которые можно качественно сопоставить с опытными данными. Рассмотрим, во-первых, тенденции в поведении температуры Нееля T_N при отклонении сплава от эквиатомного.

При увеличении содержания марганца ($c > 0.5$) избыточные атомы Mn садятся на подрешетку Me и попадают в узлы ВСП, т. е. не замораживаются в антиферромагнитной структуре матрицы. Главную роль в уменьшении T_N играет рассеяние на дефектах в подрешетке Me, ослабленное из-за малого подмешивания состояний Me к состояниям Mn, формирующим (в значительной степени) конгруэнтные участки поверхности Ферми. В то же время при уменьшении содержания Mn ($c < 0.5$), с одной стороны, часть немагнитных атомов попадает в подрешетку Mn, т. е. в пучности ВСП, разрушая АФМ порядок в подрешетке Mn, а с другой стороны, возникает примесное рассеяние, гораздо сильнее разрушающее ВСП, чем при $c > 0.5$ (примесный псевдопотенциал центрирован на узлах Mn, а не Me). Оба этих фактора способствуют понижению T_N, причем более резкому, чем при $c > 0.5$. Необходимо, однако, учесть еще один аспект изменения T_N, играющий иногда решающую роль в моделях ВСП [1]. Речь идет об изменении степени «нестинга» при легировании, к которому величина T_N чрезвычайно чувствительна. К сожалению, мы не располагаем информацией о деталях зонной структуры нестехиометрических сплавов MnMe, поэтому о величине и даже характере изменения «нестинга» можем судить лишь по косвенным признакам. Именно результаты измерения T_N в сплавах MnNi и MnPt [7, 16], которыми только и исчерпывается наша информация, говорят о более резком уменьшении $|dT_N/dx|$ при $c > 0.5$, чем при $c < 0.5$. Ясно, что это может быть объяснено лишь в предположении об ухудшении «нестинга» при добавлении избыточного Mn (который в этих сплавах при отклонении от стехиометрии играет роль донора) и, наоборот, об улучшении «нестинга» при избытке Me (Ni, Pt), играющего роль акцептора. Причем это улучшение должно быть достаточно велико, компенсируя в определенной мере падение $T_N(x)$ из-за возрастания рассеяния и уменьшения концентрации локальных моментов Mn. Рис. 1 качественно иллюстрирует зависимость $T_N(x)$ при отклонении от стехиометрического состава по Mn или Me (левая и правая ветви соответственно).

Далее обсудим поведение низкотемпературного ФМ перехода, возникающего при $T_k \ll T_N$. В сплавах эквиатомного состава и при $c < 0.5$ ФМ переход не обнаружен вплоть до самых низких температур [11], хотя в некоторых системах (например, MnIr) наблюдались тенденция к сильному парамагнетизму и возрастание восприимчивости [13]. При увеличении содержания марганца ($c > 0.5$) T_k возрастает пропорционально отклонению от стехиометрии из-за появления незамороженных локальных спинов Mn на подрешетке Me (рис. 1). Экспериментальное исследование сплава MnIr [13] при низких температурах показало возрастание T_k при увеличении содержания Mn. Результаты экспериментов в сплавах Mn с Ni, Pd, Pt противоречивы: в [17] при температурах ~100 K наблюдается слабый ферромагнетизм, а в [11] в температурной области от T_N до температуры жидкого азота ФМ порядок не обнаружен. Результаты исследования в области более низких температур нам не известны.

Наличие пика в магнитной восприимчивости при T_N в сплавах MnNi, MnPd, MnRh [11, 12] и его отсутствие в сплаве MnPt [11], связаны, по-видимому, с тем, что в сплавах Mn (Ni, Pd, Pt) аномально сильны эффекты магнитострикции из-за близости структурного перехода, приводя к первому роду АФМ перехода, тогда как в MnPt АФМ переход идет вторым родом. Вклад в магнитную восприимчивость сплава MnMe χ (T) от локальных моментов Mn качественно изображен на рис. 2. В парамагнитной области χ (T) подчиняется закону Кюри—Вейса и ниже T_N слабо зависит от T. При $c > 0.5$ в области низких температур $T \ll T_N$ выполняется закон Кюри—Вейса и χ (T) расходится при $T \to T_k$. Экспериментальное пове-

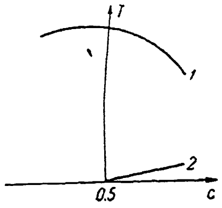

Рис. 1. Зависимости температур Нееля (*1*) и Кюри (*2*) от содержания марганца в сплаве.

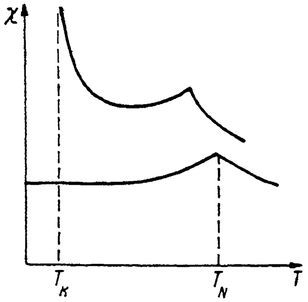

Рис. 2. Зависимости магнитной восприимчивости от температуры при содержании марганца $c > 0.5$ (*1*) и $c \leqslant 0.5$ (*2*).

дение χ (T) качественно согласуется с теоретической зависимостью для сплавов Mn (Ni, Rh, Ir) [11–13]. В сплавах Mn (Pd, Pt) в парамагнитной области восприимчивость почти не зависит от T [11], что свидетельствует о преобладающем вкладе в χ (T) пауллиевской (зонной) компоненты. В сплаве MnNi (Fe) экспериментально наблюдается резкое увеличение $\chi(T)$ в области $T < T_N$ с ростом концентрации Fe [14]. В рамках нашей модели эта тенденция к ферромагнетизму может быть связана как с появлением слабо взаимодействующих с ВСП локальных спинов Fe на подрешетке Me, так и с возможным разрушением ВСП вблизи примеси Fe на подрешетке Mn, приводящим к размораживанию локальных спинов Mn в ближайшем окружении Fe и их последующему ФМ упорядочению.

Таким образом, подводя итог нашему рассмотрению, можно констатировать явный недостаток экспериментальных данных по магнитным свойствам сплавов MnMe, а также расчетов электронной структуры стехиометрических (за исключением MnNi) и слабо нестехиометрических систем этого типа, не позволяющий довести сравнение теории и эксперимента хотя бы до полуколичественного уровня. В то же время качественные особенности поведения T_N, T_k, χ (T) могут быть приемлемым образом объяснены.

Список литературы

[1] Куликов Н. И., Тугушев В. В. // УФН. 1984. Т. 144. № 1. С. 643—680.
[2] Горьков Л. П. // УФН. 1984. Т. 144. № 3. С. 381—413.
[3] Кулатов Э. Т., Куликов Н. И., Тугушев В. В. // Тр. ИОФАН, 1986. Т. 3. С. 122—142.
[4] Schrieffer J., Wen X., Zhang S. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 16. P. 11663—11679.
[5] Moriya T. Spin fluctuations in itinerant electron magnetism. Springer, Berlin, 1985.
[6] Волков Б. А., Мнацаканов Т. Т. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 2. С. 563—576.
[7] Kren E., Nagy E., Nagy I., Pal L., Szabo P. // J. Phys. Chem. Sol. 1968. V. 29. P. 101—108.
[8] Kren E., Solyom J. // Phys. Lett. 1966. V. 22. N 3. P. 273—275.
[9] Kren E., Cselik M., Kadar G., Pal L. // Phys. Lett. 1967. V. 24A. N 4. P. 198—200.
[10] Винтайкин Е. З., Дмитриев В. Б., Макушев С. Ю., Удовенко В. А. // ФММ. 1987. Т. 63. № 3. С. 577—581.
[11] Pal L., Kren E., Kadar G., Szabo P., Tainoczi T. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. N 2. P. 538—544.

[12] Kouvel J. S., Hartelius C. C., Osica L. M. // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. N 4. P. 1095—1096.
[13] Brun K., Kjekshys A., Pearson W. B. // Acta Chem. Scand. 1965. V. 19. N 1. P. 107—112.
[14] Егорушкин В. Е., Кульков С. Н., Кулькова С. Е. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 2. С. 599—605.
[15] Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. М., 1962. 876 с.
[16] Andresen A. F., Kjekshus A., Mollerud R., Pearson W. P. // Phil. Mag. 1965. V. 11. N 114. P. 1245—1256.
[17] Brun K., Kjenshus A., Pearson W. B. // Acta Chemica Scand. 1965. V. 19. N 2. P. 477—484.

Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
12 января 1990 г.