

Влияние магнитофононного взаимодействия на магнитные свойства ферромагнетика: модельные расчеты

© В.Ю. Бодряков, А.А. Повзнер

Уральский государственный технический университет,
620002 Екатеринбург, Россия

E-mail: povz@kf.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 29 июля 2003 г.)

На основании термодинамического анализа и модельных расчетов для изотропного ферромагнетика показано, что учет взаимодействия магнитной и фононной подсистем, выражающийся, в частности, в зависимости температуры Дебая от намагниченности, приводит к перенормировке уравнения магнитного состояния и появлению температурной зависимости термодинамических коэффициентов Ландау, считающихся постоянными. Следствием такой зависимости, например, является наблюдающееся экспериментально различие „истинной“ и парамагнитной температур Кюри ферромагнетика.

Ранее [1] на примере ферромагнитного гадолиния нами было показано, что в окрестности точки Кюри характеристическая температура Дебая ферромагнетика $\theta(M, T)$ может быть приближенно представлена в виде суммы „немагнитной“ части θ_{para} и магнитной части θ_m , в свою очередь имеющей вид двойного ряда по четным степеням намагниченности M и „расстояния“ до точки Кюри $t = T - T_c$:

$$\theta = \theta_{\text{para}} + \theta_{00} + \frac{1}{2} \theta_{10} M^2 + \frac{1}{2} \theta_{11} M^2 t + \frac{1}{4} \theta_{20} M^4 + \dots, \quad (1)$$

где θ_{para} — „парамагнитные остов“ температуры Дебая; $\theta_{ij}(T)$ — термодинамические коэффициенты ряда; $M = M(T, H)$ — молярная намагниченность в соответствующем образом нормированном магнитном поле H . „Свободный“ член θ_{00} можно интерпретировать как скачок температуры Дебая в точке Кюри [2]. Однако подробного термодинамического анализа влияния представления θ в виде (1) на получаемые при этом теоретические магнитные характеристики ферромагнетика проведено не было. Мы намерены осуществить такой анализ в настоящей работе, сопроводив его соответствующими модельными расчетами, выполненными с помощью специально написанной программы для персонального компьютера.

Качественное обоснование разложения вида (1) следует из зависимости температуры Дебая от молярного объема V и модуля всестороннего сжатия K (см., например, [3–6]) и из соответствующих зависимостей последних от M^2 и t

$$\theta = \frac{\hbar(6\pi^2 N_A)^{1/3}}{k_B} \sqrt{\frac{3}{\mu}} \Xi^{1/2} K^{1/2} V^{1/6}, \quad (2)$$

где \hbar , N_A , k_B — постоянные Планка, Авогадро и Больцмана соответственно, μ — молярная масса; Ξ — функция, зависящая от коэффициента Пуассона σ вещества (предполагается, что она не зависит от температуры и намагниченности).

Разложение вида (1) можно было бы дополнить членами более высоких порядков, однако, как показано далее, уже первых четырех членов достаточно для описания ряда особенностей поведения намагниченности и магнитной восприимчивости ферромагнетика, не охватываемых традиционной теорией фазовых переходов второго рода (ТФПВР) Ландау. Кроме того, выписывание дополнительных членов не обосновано как ввиду физической ограниченности и применимости самой теории Ландау, так и вследствие точности эксперимента.

Таким образом, магнитную составляющую полного термодинамического потенциала (ТДП), включающего „постоянный“ (не зависящий от температуры или намагниченности) член Φ_0 , а также фононную (решеточную) Φ_p , электронную Φ_e и обменную Φ_m составляющие:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_p + \Phi_e + \Phi_m, \quad (3)$$

имеет не только обменная часть ТДП

$$\Phi_m = \frac{1}{2} \alpha M^2 + \frac{1}{4} \beta M^4 - HM, \quad (4)$$

но и его фононная часть (через соответствующую зависимость температуры Дебая (1))

$$\Phi_p = 3R \left[\frac{3}{8} \theta + f(z) \right]. \quad (5)$$

В (4) введены обозначения α и β для зависящих от температуры термодинамических коэффициентов Ландау, причем в ТФПВР Ландау предполагается справедливым приближение $\alpha = a(T - T_c)$, $a = \text{const} > 0$, $\beta = \text{const} > 0$. Для производных введенной функции $f(z) = \ln(1 - e^{-z}) - \frac{1}{3} D(z)$ по аргументу $z = \theta/T$ имеем соотношения [4] $f'(z) = D(z)/z$, $f''(z) = -C_{VR}(z)/z^2$, где $D(z)$ и $C_{VR}(z)$ — табулированные функция Дебая и нормированная на единицу дебаевская теплоемкость соответственно; R — газовая постоянная.

Уравнение магнитного состояния (УМС) ферромагнетика, определяемое процедурой минимизации ТДП по параметру порядка (намагниченности),

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial M}\right)_{TRH} = \left(\frac{\partial \Phi_p}{\partial M}\right)_{TRH} + \left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial M}\right)_{TRH} = 0 \quad (6)$$

содержит не только обменную часть, как в традиционной интерпретации ТФПВР, но и фононный вклад, который можно интерпретировать как следствие взаимодействия магнитной и фононной подсистем ферромагнетика

$$\frac{H}{M} = 3R\theta_{10} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] + \left\{ a + 3R\theta_{11} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \right\} \times (T - T_C) + \left\{ \beta + 3R\theta_{20} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \right\} M^2. \quad (7)$$

Таким образом, учет магнитофонного взаимодействия (МФВ) приводит к перенормировке УМС ферромагнетика, которое по-прежнему может быть записано в традиционном, принятом в теории Ландау виде, но с перенормированными термодинамическими коэффициентами и температурой Кюри

$$\frac{H}{M} = a^*(T - T_C^*) + \beta^* M^2, \quad (8)$$

где

$$a^* = a + 3R\theta_{11} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right], \quad (9)$$

$$T_C^* = T_C + \frac{3R\theta_{10} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right]}{a + 3R\theta_{11} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right]}, \quad (10)$$

$$\beta^* = \beta + 3R\theta_{20} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right]. \quad (11)$$

Для спонтанной намагниченности ($H = 0$) ферромагнетика вместо традиционного выражения $M_s^2 = -\frac{a(T-T_C)}{\beta}$ с учетом (9)–(11) имеем $M_s^2 = -\frac{a^*(T-T_C^*)}{\beta^*}$, где термодинамические коэффициенты a^* и β^* явным и достаточно сложным образом зависят от температуры. Смещение точки Кюри, обусловленное МФВ, в большинстве случаев, по-видимому, относительно мало. „Исходную“ (или обменную) температуру Кюри T_C можно интерпретировать как некоторый термодинамический параметр, описывающий характер чисто обменного взаимодействия в данном ферромагнетике. „Истинная“ (или техническая) точка Кюри T_C^* в комплексе характеризует ферромагнетик с учетом МФВ.

Следует отметить немаловажное обстоятельство. В перенормированных термодинамических коэффициентах a^* и β^* в отличие от температуры Кюри T_C^* отсутствует член, содержащий θ_{10} . Иными словами, „включение“ механизма МФВ, приводящее к заметной перенормировке магнитных свойств ферромагнетика, происходит при более высоких порядках, чем простое

($\theta \sim M^2$), как это предполагалось, например, в [7,8]. Следовательно, учет такого взаимодействия целесообразен лишь для тех ферромагнетиков, для которых МВФ, называемое также магнитообъемным или магнитоупругим достаточно велико. Примером таких ферромагнетиков являются сплавы инварного класса. Для ферромагнетиков, в которых МВФ не слишком велико и его учет в температуре Дебая достаточно ограничить членами $\theta \sim M^2$, ТФПВР Ландау оказывается вполне работоспособной.

Мы не будем углубляться в детальный термодинамический анализ выписанных выражений; его легко провести. Укажем лишь, что для „низкотемпературных“ ферромагнетиков ($T, T_C \ll \theta$) теория Ландау с учетом перенормировки термодинамических коэффициентов дает хорошее описание поведения магнитных свойств, даже если МФВ и не мало. Для „высокотемпературных“ ферромагнетиков ($T, T_C \geq \theta$) МФВ может вносить существенные коррективы в результаты, получаемые в рамках традиционной ТФПВР.

Заметим также, что, например, при достаточно большой величине МФВ и выполнении условия $T_C^* \leq 0$ вещество не становится ферромагнитным ни при каких конечных температурах, хотя обменное взаимодействие таково, что в отсутствие МФВ ферромагнитное упорядочение должно было бы иметь место. Необходимым (но недостаточным) условием для этого является $\theta_{10} \leq 0$. Другой случай, когда вещество остается парамагнитным при всех конечных температурах, $\beta^* \leq 0$, что реализуется (с учетом требования $\beta > 0$) при $\theta_{20} \leq 0$. Возможно, что именно такая ситуация (реализация одного из двух условий) имеет место в случае парамагнитного скандия [9,10]. К сожалению, ограниченность необходимого экспериментального материала для Sc не позволяет провести более детальное рассмотрение этого вопроса.

В целом же введу относительно медленного изменения функции $D(z)/z$ с температурой в узкой окрестности точки Кюри по сравнению с зависимостью, пропорциональной $t = T - T_C$, поведение температурной зависимости спонтанной намагниченности ферромагнетика качественно близко к предсказываемому традиционной теорией Ландау. Лишь при достаточном удалении от точки Кюри начинают все более заметно проявляться эффекты, обусловленные МВФ.

Наиболее удобной характеристикой ферромагнетика, определяющей поведение его магнитных свойств в области температур, удаленной от точки магнитного превращения, является начальная магнитная восприимчивость $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{TP}$ (при $H \rightarrow 0$) или ее обратная величина χ^{-1} . Из УМС (8) видно, что $\chi^{-1} = a^*(T - T_C^*)$ при $T > T_C^*$ и $\chi^{-1} = -2a^*(T - T_C^*)$ при $T < T_C^*$, так что „правило двойки Гинзбурга“ [11] выполняется для ферромагнетика и при учете МФВ. Линейный (согласно теории Ландау) ход зависимости $\chi^{-1}(T)$ широко используется экспериментаторами для оценки температуры Кюри [12]. Часто такая оценка является весьма

Значения термодинамических параметров (в arb.units) для двух типов расчетов

Параметр	Тип I	Тип II
θ_{00}	-2	-2
θ_{10}	0.04	-0.04
θ_{11}	0.02	0.02
θ_{20}	0.00396	0.00408
T_C^*	300.866	299.134
T_{Cp}	321.30	321.27

приблизительной, так как нередко парамагнитная точка Кюри T_{Cp} (точка пересечения оси температур прямой, интерполирующей зависимость $\chi^{-1}(T)$ в области повышенных температур) на несколько десятков кельвинов превышает фактическую точку Кюри T_C^* . Такое расхождение до сих пор не получило достоверного объяснения.

При учете МФВ при повышенных температурах ($T \gg \theta$) зависимость $\chi^{-1}(T)$ не является линейной

$$\chi^{-1}(T) = \left\{ a + 3R\theta_{11} \frac{T}{\theta} \right\} (T - T_C). \quad (12)$$

В частности, при $\theta_{11} > 0$ зависимость $\chi^{-1}(T)$ по мере повышения температуры все более отклоняется вверх, так что прямая, интерполирующая температурную зависимость $\chi^{-1}(T)$, при повышенных температурах пересечет ось T при температуре, превышающей T_C^* , причем точка пересечения T_{Cp} зависит как от интенсивности МФВ (через θ_{11}), так и от самого высокотемпературного интервала, используемого для линейной интерполяции. Ясен также и способ решения проблемы: квадратичная, а не линейная интерполяция зависимости $\chi^{-1}(T)$ должна обеспечить хорошее соответствие T_{Cp} и T_C^* .

Для интерполяции изложенных выше теоретических выкладок авторы провели модельные расчеты с помощью специально написанной для персонального компьютера программы. С целью большей общности результаты расчетов представлены в графическом виде (рис. 1–4) в приведенных величинах. Не изменявшиеся при расчетах параметрам были присвоены следующие значения (в относительных единицах — arb.units); $a = 1.0$, $\beta = 0.1$, $H = 0$, $T_C = 300$, $\theta_{para} = 200$.

В соответствии с двумя возможными типами поведения температурной зависимости $\theta_m(T)$ — увеличение либо уменьшение θ_m по мере углубления в ферромагнитную область после характерного скачка в точке Кюри T_C — было выполнено два типа вычислений (соответственно тип I и тип II). Принятые при расчетах значения термодинамических параметров представлены в таблице. Приведенная температурная зависимость $o_m(T) = \theta_m(T)/\theta_{para}$ определяется следующим

выражением:

$$o_m = o_{00} + \frac{1}{2} o_{10} m^2 + \frac{1}{2} o_{11} m^2 \tau + \frac{1}{4} o_{20} m^4 + \dots, \quad (13)$$

где приведенные термодинамические коэффициенты, намагниченность, температура соответственно равны $o_{ij} = \theta_{ij}/\theta_{para}$, $m = M(T, H)/M(0, 0)$, $\tau = (T - T_C)/T_C$.

На рис. 1 представлена температурная зависимость магнитной части приведенной температуры Дебая $o_m(T)$ типа I (параметры $o_{10}, \theta_{10} > 0$). Такой тип поведения температуры Дебая характерен, например, для гадолиния [1,2]. На рис. 2 приведена температурная зависимость спонтанной намагниченности без учета и с учетом МФВ. Видно, что, хотя качественно ход зависимости $m(T, 0)$ не изменяется и остается подобным предсказываемому теорией Ландау, сама величина намагниченности при учете МФВ довольно заметно уменьшается. При этом разница между T_C и T_C^* невелика (см. таблицу).

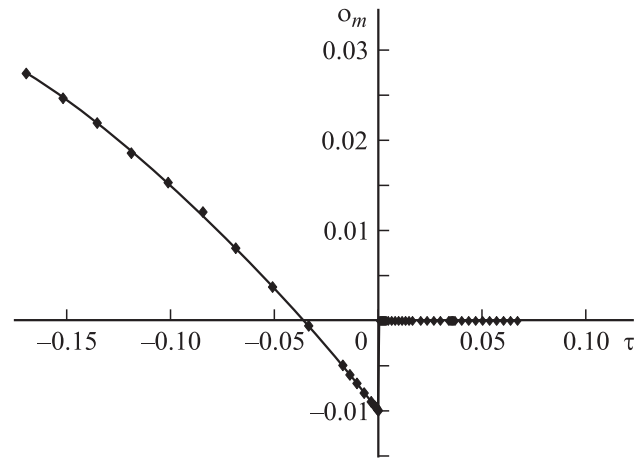


Рис. 1. Температурная зависимость магнитной части приведенной температуры Дебая ферромагнетика при учете МФВ (модельные расчеты типа I).

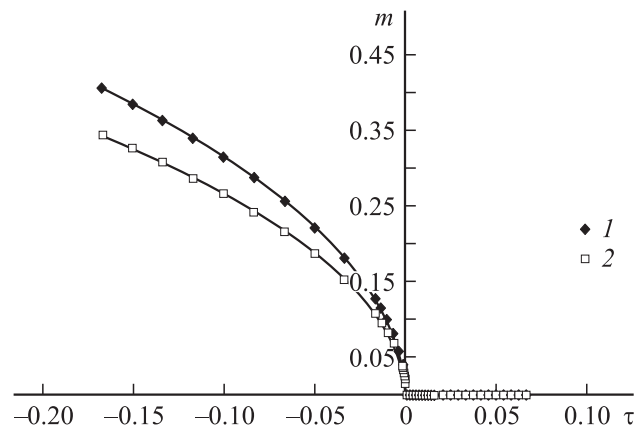


Рис. 2. Температурная зависимость приведенной намагниченности ферромагнетика. Модельные расчеты типа I: 1 — без учета МФВ, 2 — с учетом МФВ.

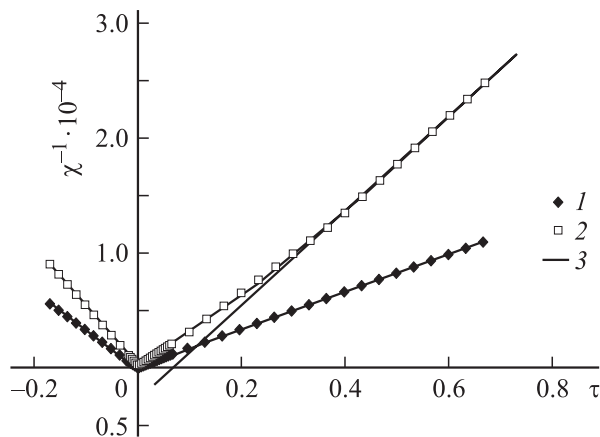


Рис. 3. Температурная зависимость приведенной магнитной восприимчивости ферромагнетика. Модельные расчеты типа I и II: 1 — без учета МФВ, 2 — с учетом МФВ, 3 — прямая линейной регрессии в области повышенных температур.

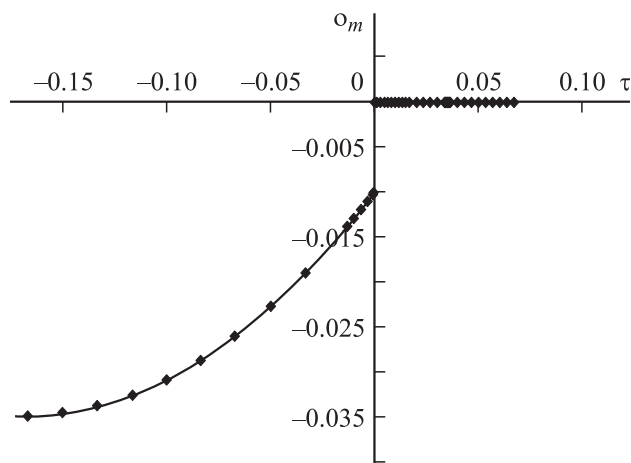


Рис. 4. Температурная зависимость магнитной части приведенной температуры Дебая ферромагнетика (модельные расчеты типа II).

Наглядное представление о ходе температурной зависимости обратной приведенной начальной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T) = \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_{TP}^{-1}$ (при $H \rightarrow 0$) для ферромагнетика при расчете типа I дает рис. 3, на котором показан ход $\chi^{-1}(T)$ без учета и с учетом МФВ. Видно, что учет МФВ весьма заметно увеличивает наклон зависимости $\chi^{-1}(T)$ как в ферромагнитной, так и в парамагнитной области ферромагнетика; кроме того, зависимость $\chi^{-1}(T)$ в области повышенных температур не является линейной. Прямая, аппроксимирующая высокотемпературный ход $\chi^{-1}(T)$, пересекает температурную ось не в точке T_C или T_C^* , а при значительно более высокой парамагнитной температуре Кюри T_{Cp} (см. таблицу).

На рис. 4 (аналогично рис. 1) представлена температурная зависимость магнитной части приведенной температуры Дебая $o_m(T)$ типа II (параметры $o_{10}, \theta_{10} < 0$).

Такой тип поведения температуры Дебая характерен, по-видимому, для никеля и сплавов на железо-никелевой основе инварного класса. Отсутствие достаточного экспериментального материала по этому поводу не позволяет делать более определенные выводы. Ход зависимостей $m(T, 0)$ для ферромагнетиков при этом типе расчета для выбранного соотношения термодинамических параметров качественно аналогичен таковому для ферромагнетика при расчете типа I, поэтому мы не приводим данных зависимостей на отдельном рисунке. Отметим лишь слабое уменьшение температуры Кюри T_C^* по сравнению с T_C в отличие от расчета типа I (см. таблицу).

Рис. 3 также дает представление о ходе температурной зависимости обратной приведенной начальной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ для ферромагнетика при расчете типа II без учета и с учетом МФВ. Эта зависимость в соответствии с представленным выше термодинамическим рассмотрением аналогична зависимости $\chi^{-1}(T)$, полученной при расчете типа I, несмотря на то что ход температурной зависимости $o_m(T)$ в случае расчета типа II изменялся кардинальным образом. В парамагнитной области ферромагнетика при расчете типа II зависимость $\chi^{-1}(T)$ в области повышенных температур не является линейной. Прямая, аппроксимирующая высокотемпературный ход $\chi^{-1}(T)$, также как и в случае расчета типа I, пересекает температурную ось не в точке T_C или T_C^* , а при заметно более высокой парамагнитной температуре Кюри T_{Cp} (см. таблицу).

Таким образом, на основании термодинамического анализа и модельных расчетов в настоящей работе получены следующие основные результаты.

1) На основании феноменологического выражения для температурной зависимости магнитной части температуры Дебая, являющейся следствием взаимодействия магнитной и фононной подсистем ферромагнетика, показано, что учет МФВ приводит к перенормировке термодинамического потенциала ферромагнетика и уравнения магнитного состояния.

2) Показано, что учет МФВ автоматически приводит к появлению температурной зависимости считающихся не зависящими от температуры (в традиционной ТФПВР Ландау) термодинамических коэффициентов.

3) Учет МФВ в зависимости от знаков и соотношения термодинамических коэффициентов приводит к некоторому возрастанию или убыванию температуры Кюри. Однако качественно ход температурной зависимости спонтанной намагниченности ферромагнетика при этом может не измениться и остается близким к предсказываемому теорией Ландау. При этом изменяется абсолютная величина намагниченности.

4) Наиболее заметным образом учет МФВ проявляется в изменении хода температурной зависимости обратной начальной магнитной восприимчивости, особенно в области повышенных температур.

5) Продемонстрировано, что МФВ в ферромагнетике может быть одной из основных причин известного расхождения в величинах „истинной“ и парамагнитной температуры Кюри.

Список литературы

- [1] V.Yu. Bodryakov, A.A. Povzner, S.A. Nikitin. EPJ B **4**, 4, 441 (1998).
- [2] M. Rosen. Phys. Rev. **174**, 2, 504 (1968).
- [3] В.Ю. Бодряков, А.А. Повзнер, О.Г. Зелокова. ФММ **87**, 4, 13 (1999).
- [4] В.Ю. Бодряков, А.А. Повзнер. ФММ **89**, 5, 15 (2000).
- [5] В.Ю. Бодряков, А.А. Повзнер. Самосогласованная термодинамическая модель кристаллической решетки твердого тела. Ч. I. УГТУ–УПИ, Екатеринбург (2002). 95 с.
- [6] В.Ю. Бодряков, А.А. Повзнер. ЖТФ **73**, 7, 136 (2003).
- [7] В.М. Зверев, В.П. Силин. ЖЭТФ **93**, 2(8), 709 (1987).
- [8] В.М. Зверев. ЖЭТФ **112**, 5(11), 1963 (1997).
- [9] Э.В. Голошина, В.П. Дякина, В.Е. Старцев. ФММ **83**, 3, 5 (1997).
- [10] В.Ю. Бодряков, В.В. Петрушкин, А.А. Повзнер. ФММ **89**, 4, 5 (2000).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Статистическая физика. Ч. I. Наука, М. (1976). 586 с.
- [12] К.П. Белов. Магнитные превращения. ГИФМЛ, М. (1959). 259 с.