

УДК 537.611.45
© 1991

ВЛИЯНИЕ РЕЗОНАНСНОГО ПРИМЕСНОГО РАССЕЯНИЯ И МАГНИТОСТРИКЦИИ НА АНТИФЕРРОМАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В РАЗБАВЛЕННЫХ СПЛАВАХ ХРОМА С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

В. Ю. Галкин, В. В. Тугушев, Т. Е. Тугушева

Экспериментально изучено влияние легирования Mn и V на род антиферромагнитного перехода, температурные зависимости электросопротивления $\rho(T)$ и теплового расширения $\Delta l/l(T)$ вблизи точки Нееля T_N в разбавленных сплавах Cr—Si—Mn(V). В рамках модели волны спиновой плотности с учетом эффектов резонансного примесного рассеяния и магнитострикции рассчитаны магнитные фазовые диаграммы указанных сплавов и зависимости $\Delta l/l(T)$ вблизи T_N .

Магнитные свойства многих разбавленных сплавов хрома успешно описываются в модели волны спиновой плотности (ВСП) [1]. В этой модели причина антиферромагнитной (АФ) неустойчивости связывается с наличием электронного (в точке Γ) и дырочного (в точке H) квазиоктаэдров, формирующих часть поверхности Ферми хрома и обладающих свойством «нестинга» — совпадения (более или менее идеального) при трансляции на волновой вектор $Q=(2\pi/a)(100)$, a — параметр ОЦК решетки. Степень отклонения от идеального «нестинга» μ , т. е. несовпадения объемов электронного и дырочного квазиоктаэдров, и частота рассеяния ν (электрон-примесного, электрон-фононного) играют ключевую роль в применении модели ВСП к сплавам хрома, определяя вид фазовой диаграммы $T_N(x)$ (x — концентрация примеси), тип АФ структуры (удвоенную либо несоизмеримую), род АФ перехода, величину щели в электронном спектре и т. д. (подробнее см., например, обзор [1]). Простой подход, в котором влияние легирования сводится к заданию модельных линейных по x зависимостей $\mu(x)$ и $\nu(x)$ и построению фазовой диаграммы $T_N(x)$ из универсальных для схемы ВСП зависимостей $T_N(\mu, \nu)$, оказывается чрезвычайно эффективным для сплавов хрома с переходными 4d- и 5d-металлами (W, Mo, Ru, Rh, Pd, Re, Os, Pt) и 3d-металлами (Mn, V, Ni). По-иному обстоит дело в сплавах хрома с *sp*-металлами (Si, Ge, Al, Ga), фазовые диаграммы которых имеют необычный вид и существенно отличаются от сплавов с немагнитными переходными металлами [1]. Четкое понимание причин этого отличия до сих пор отсутствовало.

Данная работа преследует цель обсудить влияние эффектов резонансного примесного рассеяния и магнитострикции на вид фазовой диаграммы $T_N(x)$, поскольку эти эффекты в должной мере ранее не принимались во внимание при исследовании сплавов хрома с *sp*-металлами. Конкретно речь пойдет о системе Cr—Si—Mn(V) (с фиксированным содержанием *sp*-примеси Si), позволяющей проследить влияние резонансного и потенциального рассеяния, а также изменения «нестинга» на формирование ВСП. Ключевым обстоятельством, позволяющим «управлять» этими эффектами достаточно независимо, является различное поведение Si, Mn и V в мат-

рипе Cr. Так, влияние Mn с большой точностью сводится просто к изменению μ (улучшению «нестинга»), что связано с его положением донора по отношению к хрому. Введение V также моделируется изменением μ , но в противоположную сторону («нестинг» ухудшается) из-за акцепторного характера V в Cr; кроме того, необходим учет слабого потенциального рассеяния [2]. Si в матрице Cr, судя по всему, является сильным резонансным рассеивателем [1] и относительно мало (по сравнению с Mn и V) изменяет μ , хотя для количественного согласия с экспериментом донорный характер Si в Cr ниже будет учтен.

Интерес к системе Cr—Si—Mn(V) обусловлен еще целым рядом причин. Во-первых, это нетрадиционный вид фазовой диаграммы с нехарактерным для разбавленных сплавов хрома ярко выраженным первым родом перехода в состояние соизмеримой ВСП: для бинарных сплавов Cr—Si в диапазоне составов $1.3\% \geq x_{Si} \geq 1\%$ экспериментально установлено наличие значительных скачков магнитной восприимчивости $\chi(T)$ (см., например, [4]), теплового расширения $\Delta l/l(T_N)$ [5, 6], электросопротивления $\rho(T_N)$ [7] и т. д. Проследить отдельно влияние рассеяния и «нестинга» на род перехода в фазу ВСП удобно именно в тройной системе, где удастся разделить ответственность между легирующими компонентами за оба эти фактора.

Во-вторых, интригующим представляется тот факт, что среди всех известных разбавленных сплавов Cr только сплавы Cr—Fe и Cr—Si с разными типами примесей (Fe—3d-магнитная, Si—sp-немагнитная) обладают схожими и фазовыми диаграммами, и первородными аномалиями $\rho(T)$, $\chi(T)$, $\Delta l/l(T)$ и др. при переходах в AF_0 фазу ВСП [4]. Для бинарного сплава Cr—Fe попытка объяснения первого рода перехода в фазу соизмеримой ВСП и скачков $\Delta l/l(T_N)$ была предпринята в [8] в рамках представления о сильной магнитострикции, сопровождающей переход в состояние ВСП и связанной с нестабильностью магнитной 3d-оболочки Fe в матрице Cr. Формальное перенесение идей [8] на сплав Cr—Si закончилось неудачей [5]. Не удалось даже качественно воспроизвести вид фазовой диаграммы $T_N(x_{Si})$, содержащей по сравнению с $T_N(x_{Fe})$ важную особенность — немонотонный с максимумом ход T_N при переходе в AF_0 фазу. Немонотонность фазовых диаграмм характерна и для ряда других уже упоминавшихся выше сплавов Cr с sp-элементами (Ge, Al, Ga).

Содержание работы таково. В разделе 1 приведены результаты экспериментального изучения влияния легирования Mn и V на род перехода и величину T_N для тройной системы Cr—Si—Mn(V). Раздел 2 посвящен рассмотрению некоторых особенностей модели ВСП, позволяющих использовать ее для расчета немонотонных магнитных фазовых диаграмм $T_N(x)$ сплавов Cr с sp-элементами как для второго, так и для слабого первого рода АФ перехода. Там же приведен конкретный расчет зависимостей $T_N(x_{Si})$, $T_N(x_{Mn, V})$ и скачков $\Delta l/l(T_N)$ для бинарной и тройной системы соответственно. Полученные результаты и их применимость к другим сплавам хрома с sp-элементами обсуждены.

1. Экспериментальные результаты

Для экспериментального исследования в качестве исходного был выбран сплав Cr—1.3% Si, обладающий значительными первородными аномалиями своих характеристик в точке перехода в соизмеримую AF_0 фазу (см., например, [5]). Проводились измерения температурных зависимостей электросопротивления $\rho(T)$ в диапазоне температур 4.2—400 К и $\Delta l/l(T)$ в интервале 80—700 К для тройной системы сплавов Cr—

¹ Согласно нейтронографическим исследованиям [3], при концентрациях $Si \approx 1\%$ (которые здесь и далее даются в ат.%) происходит переход в соизмеримую (AF_0) фазу ВСП.

1.3 % Si— x % Mn(V), полученной добавлением в исходный сплав примесей Mn или V.

Методики приготовления образцов сплавов и измерения $\rho(T)$ такие же, как и в [2]. Измерения температурных зависимостей $\Delta l/l(T)$

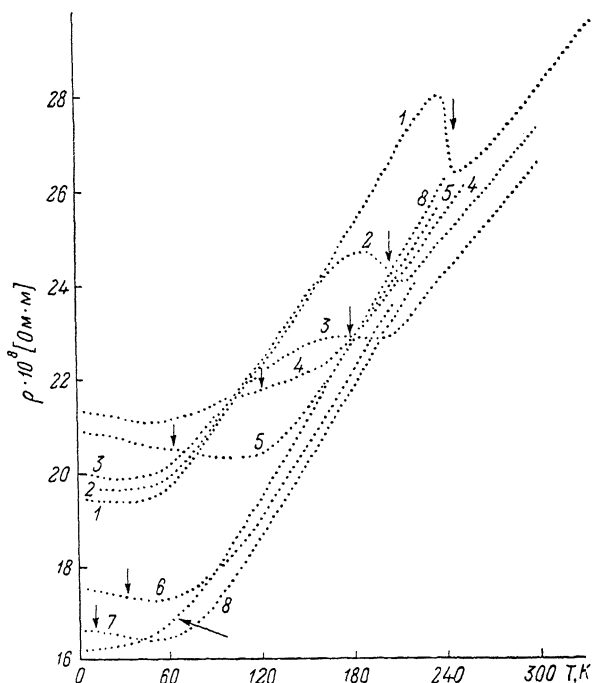


Рис. 1. Семейство температурных зависимостей электросопротивления тройных сплавов Cr—1.3 % Si— x % V при $x_V=0$ (1), 0.04 (2), 0.09 (3), 0.23 (4), 0.42 (5), 0.59 (6), 0.81 (7), 0.99 % (8).

проводились на дилатометрах DL 1500 (фирмы «Shinku (Riku)») и L75/30 (фирмы «Linsize») [9]. Концентрации легирующих элементов, определен-

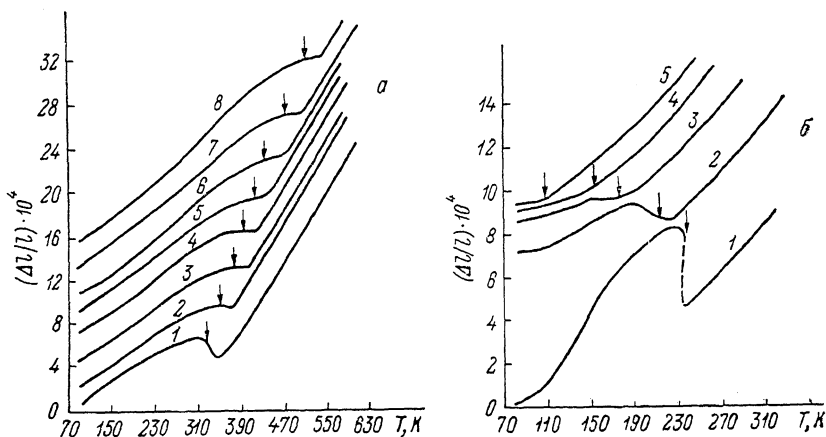


Рис. 2. Семейства зависимостей $\Delta l/l(T)$ тройных сплавов.

а: Cr—1.3 % Si— x % Mn при $x_{Mn}=0.17$ (1), 0.3 (2), 0.47 (3), 0.61 (4), 0.73 (5), 1.13 (6), 1.59 (7), 2.32 % (8); б: Cr—1.3 % Si— x % V при $x_V=0.0$ (1), 0.04 (2), 0.09 (3), 0.15 (4), 0.31 % (5).

ные методом эмиссионного спектрального анализа с плазменным источником возбуждения, оказались равными: x % Mn=0.17, 0.3, 0.47, 0.61, 0.73, 1.13, 1.59, 2.32, 3.87 и x % V=0.04, 0.09, 0.15, 0.23, 0.31, 0.42, 0.59, 0.81,

0.99, 1.53, 1.98, 3.03, 5.04. Отклонение концентрации кремния от номинального значения 1.3 % не превышало 0.06 %.

На рис. 1 приведено семейство кривых $\rho(T)$ некоторых сплавов Cr—1.3 % Si— $x\%$ V. На рис. 2 представлены зависимости $\Delta l/l(T)$ для сплавов с Mn (а) и V (б). Температура Нееля определялась из зависимостей $\rho(T)$ и $\Delta l/l(T)$ общепринятым способом и отмечена стрелками на рис. 1, 2. Зависимость T_N от концентрации Mn и V показана точками на рис. 3.

Анализируя полученные результаты, видим, что в сплавах Cr—Si—V добавление незначительных (в пределах 0.04 %) примесей V существенно сдвигает точку Нееля в область низких температур (почти на 35 K), приводит к уменьшению аномалий $\rho(T)$ и $\Delta l/l(T)$ вблизи T_N , изменяет род АФ перехода с первого на второй (кривые 1, 2 на рис. 1; 2, б). Дальнейшее увеличение концентрации V в сплаве продолжает аномально сильно уменьшать T_N ($\partial T_N/\partial x_V \geq 800$ K/%).

При $x_V \geq 0.09$ % вид зависимостей $\rho(T)$ и $\Delta l/l(T)$ вблизи T_N меняется, происходит резкое уменьшение величины спонтанной магнитострикции, что характерно для переходов в несоизмеримую (AF_1) фазу ВСП. После этого падение T_N с кон-

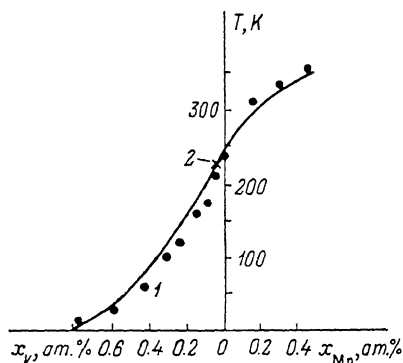


Рис. 3. Магнитная фазовая диаграмма сплавов Cr—1.3 % Si— x % Mn(V).

Сплошная линия — расчет, 1 — эксперимент, 2 — рассчитанное значение трикритической точки θ .

центрацией V замедляется более чем в два раза ($\partial T_N/\partial x_V \geq 300$ K/%), оставаясь, однако, аномально высоким. Для сравнения отметим, что в тройных сплавах Cr—Fe—V, Cr—Co—V величины $\partial T_N/\partial x_V$ при переходах в AF_0 фазу равны соответственно ~ 340 и 200, а в AF_1 фазу — ~ 120 и 50 K/% [10].

В сплавах Cr—Si—Mn прослеживается похожее сильное влияние примеси Mn на характер переходов в T_N : быстрый рост T_N при $x_{Mn} \leq 0.3$ %, изменение рода перехода с первого на второй при $x_{Mn} \geq 0.17$ % (рис. 2, а). Одновременно наблюдаются и некоторые важные особенности. Так, для сплавов, легированных 0.47—1.13 % Mn, обнаружено появление ниже T_N значительных инвариных аномалий с ТКЛР $\leq 10^{-6}$ град $^{-1}$ (рис. 2, а, кривые 3—5).

Таким образом, аномальное поведение $\rho(T)$ и $\Delta l/l(T)$ в тройных сплавах Cr—Si—Mn(V) наряду с известными из литературы данными по бинарным системам Cr—Si убеждают в том, что при теоретической интерпретации особенностей этих сплавов необходим учет нетрадиционных механизмов влияния примесей на формирование АФ порядка. Такой учет, включающий влияние магнитострикционных эффектов и резонансного примесного рассеяния, будет выполнен в следующем разделе.

2. Функционал Гинзбурга—Ландау и расчет фазовой диаграммы в соизмеримой фазе ВСП

Вблизи температуры Нееля для анализа термодинамических свойств сплава с ВСП удобно воспользоваться разложением термодинамического потенциала такой системы в ряд по параметру порядка $\Delta(r)$ и его производным $\Delta'(r)$. Если речь идет только о переходе в соизмеримую (однородную) фазу, то градиентные слагаемые можно явно не выписывать, имея в виду, что границы устойчивости AF_0 фазы относительно перехода в AF_1 фазу на диаграмме (T, x) известны из экспериментальных данных.

Главной нашей задачей является расчет температуры перехода в AF_0 фазу ВСП в предположении о первом роде перехода, близком ко второму,² с учетом резонансного примесного рассеяния и магнитострикции. Для этого запишем, следуя [8] и опуская очевидные промежуточные выкладки, функционал свободной энергии $F(\Delta, \mu)$ в следующем виде:

$$F(\Delta, \mu) = \Omega(\Delta, \bar{\mu}) - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{n+1} - \frac{2\eta^2}{B} \right) \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\mu}} \right)^2, \quad (1)$$

$$\bar{\mu} = \mu + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{n+1} - \frac{2\eta^2}{B} \right) \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\mu}}. \quad (2)$$

Выражения (1), (2) получаются после минимизации функционала $\mathcal{F}(\Delta, \mu, \delta) = F(\Delta, \mu + \eta\delta) + 1/2B\delta^2$ по относительному изменению объема $\delta = \Delta V/V$ в фазе ВСП. Величина $\eta = \partial \Sigma(\delta)/\partial \delta|_{\delta=0}$, где $\Sigma(\delta)$ — поправка к одноэлектронной энергии квазичастиц, связанная с объемной деформацией решетки; B — объемный модуль; n — мощность парамагнитного электронного «резервуара». Далее для наших целей необходимо удерживать в (1) слагаемые всех порядков до Δ^6 включительно, а соответственно в (2) — до Δ^4 . После несложных преобразований можно записать следующее выражение для $F(\Delta, \mu)$:

$$F(\Delta, \mu) = \Omega(\Delta, \mu) + G(\partial\Omega/\partial\mu)^2 + 2G^2(\partial\Omega/\partial\mu)^2(\partial^2\Omega/\partial\mu^2), \quad (3)$$

$$\Omega(\Delta, \mu) = C_1(\mu)\Delta^2 + C_2(\mu)\Delta^4 + C_3(\mu)\Delta^6, \quad (4)$$

$$G = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{n+1} - \frac{2\eta^2}{B} \right). \quad (5)$$

Удерживая слагаемые с необходимой точностью, перепишем $F(\Delta, \mu)$ в окончательном виде

$$F(\Delta, \mu) = \tilde{C}_1(\mu)\Delta^2 + \tilde{C}_2(\mu)\Delta^4 + \tilde{C}_3(\mu)\Delta^6, \quad \tilde{C}_1(\mu) = C_1(\mu), \quad (6), (7)$$

$$\tilde{C}_2(\mu) = C_2(\mu) + G(\partial C_1/\partial\mu)^2, \quad (8)$$

$$\tilde{C}_3(\mu) = C_3(\mu) + 2G \frac{\partial C_1}{\partial\mu} \frac{\partial C_2}{\partial\mu} + 2G^2 \left(\frac{\partial C_1}{\partial\mu} \right)^2 \frac{\partial^2 C_1}{\partial\mu^2}. \quad (9)$$

Коэффициенты C_1, C_2, C_3 вычислялись неоднократно (см., например, [11]). Они зависят от температуры T , электрон-примесного и электрон-фононного рассеяния ν и степени неидеальности «нестинга» μ . Наконец, выпишем соотношение для равновесного значения объемной деформации δ_0

$$\delta_0 = \frac{\eta}{B} \left(\frac{\partial C_1}{\partial\mu} \Delta^2 + \left(\frac{\partial C_2}{\partial\mu} + 2G \frac{\partial C_1}{\partial\mu} \frac{\partial^2 C_1}{\partial\mu^2} \right) \Delta^4 \right) \quad (10)$$

с точностью до слагаемых $\sim \Delta^4$ (удержание высших слагаемых некорректно). Для оценочных расчетов воспользуемся значением \mathcal{B} в чистом хrome [8] и примем $n=3$, после чего имеем $\eta/\mathcal{B} \approx 1 \cdot 10^{-4} (-G+1/16)^{1/2}$. Теперь отметим следующие обстоятельства. В зависимости от соотношения знаков \tilde{C}_1 и \tilde{C}_2 ($\tilde{C}_3 > 0$ всегда) функционал (6) может описывать переход как первого ($\tilde{C}_1 > 0, \tilde{C}_2 < 0$), так и второго ($\tilde{C}_1 = 0, \tilde{C}_2 > 0$) рода. Конкретно, минимизируя (6) по Δ , после несложных промежуточных вычислений получим уравнение линии перехода первого рода

$$4C_1\tilde{C}_3 = \tilde{C}_2^2. \quad (11)$$

Согласно методике работы [2], по экспериментальной фазовой диаграмме $T_N(x)$ для бинарных сплавов подбирались параметры $\partial\mu/\partial x$, $d\nu/dx$, а затем рассчитывались фазовые диаграммы тройных сплавов. Кроме того, в данной работе потребовалось определить значение параметра $G(x)$.

² Это предположение связано с условием применимости разложения Гинзбурга—Ландау для свободной энергии F в ряд по Δ (ν): $|\Delta| < \max(\pi T, \mu, \nu)$.

Нетрудно видеть, что вклад магнитострикционных слагаемых в $F(\Delta, \mu)$ пропорционален Δ^4 и более высоким степеням Δ , поэтому линия перехода второго рода (точнее, граница абсолютной неустойчивости AF_0 фазы ВСП относительно парамагнитной (P) фазы) может быть найдена просто из обращения в нуль коэффициента $\bar{C}_1(\mu) \equiv C_1$. Точно так же в предположении, что переход из парамагнитной в AF_1 фазу идет вторым родом (а это соответствует экспериментальной ситуации [5, 6]), можно легко определить тройную точку на фазовой диаграмме $T_N(x)$, соответствующей пересечению линий $P-AF_0$, $P-AF_1$ и AF_0-AF_1 переходов. Добавив в (6) слагаемые $\sim(\Delta')^2$ и $(\Delta'')^2$, вычислим линию перехода в AF_1 фазу, ограничиваясь в (6) только квадратичным по Δ слагаемым. В дальнейшем мы не будем больше останавливаться на этом вопросе и отметим линию AF_1-P перехода непосредственно на фазовой диаграмме.

Обсудим выбор зависимостей $\mu(x)$, $\nu(x)$ и $G(x)$, которые определяют характер поведения T_N в сплавах Cr—Si—Mn(V). В «линейном» по $x \ll 1$ приближении запишем

$$\mu = \mu_{Cr} - \mu_{Mn}x_{Mn} + \mu_Vx_V - \mu_{Si}x_{Si}, \quad (12)$$

$$\nu(\mu) = 0.24\pi T + \nu_Vx_V + \nu_{Si}(\mu)x_{Si}, \quad (13)$$

$$G(\mu) = g_{Cr} + g_Vx_V + g_{Si}(\mu)x_{Si}. \quad (14)$$

Линеаризация зависимости $\mu(x) = \mu_{Cr} + \sum_i A^i x_i$ является естественной для разбавленных сплавов при малых x_i и соответствует слабому изменению разницы объемов квазикоктаэдров в точках Γ и H при добавлении электронов и дырок. Знак и величина коэффициентов A^i определяются донорным или акцепторным типом примеси. Линейная зависимость $\nu(x)$ отвечает обычному потенциальному рассеянию на примеси с некоторой эффективной амплитудой V_1 : $\nu(x) = \nu_{ph} + B^i x_i$, $B^i \sim N(0) < V_1^2 > [2]$; $\nu_{ph} = 0.24 \pi T$ — фононный вклад в рассеяние [8]. В случае сплавов с Si примесное рассеяние носит более сложный характер, так как собственный локальный уровень примеси ϵ_f попадает в континуум зонных состояний матрицы хрома [12] и амплитуда рассеяния становится более сложной функцией параметра μ , играющего в нашей задаче роль химического потенциала частиц. Конкретно при записи (12)—(14) были заложены следующие предположения о характере легирующих примесей Mn, V и Si в Cr. Mn сдвигает μ в сторону улучшения «нестинга» и является очень слабым рассеивателем; его влияние хорошо описывается в приближении жесткой зоны сдвигом μ . V сдвигает μ в сторону ухудшения «нестинга» и является слабым потенциальным рассеивателем; его влияние хорошо моделируется сдвигом μ в жесткой зоне и введением частоты рассеяния $\nu_i \sim \nu_V x_V$, коэффициент ν_V пропорционален сечению рассеяния зонного электрона на примеси V в борновском приближении. Si сдвигает μ в ту же сторону, что и Mn, но с меньшей интенсивностью, и является резонансным рассеивателем. Частота рассеяния электрона на примеси Si содержит как потенциальную, так и резонансную компоненты, причем последняя зависит от положения виртуального примесного уровня ϵ_f относительно μ . Ширину резонанса будем считать достаточно большой для того, чтобы можно было в интервале интересующих нас изменений μ ограничиться в зависимости $\nu_{Si}(\mu)$ простейшей аппроксимацией

$$\nu_{Si}(\mu) = \begin{cases} \nu_0, & \mu \leq \mu^*, \\ \nu_0 + \nu_1(\mu - \mu^*), & \mu > \mu^*, \end{cases} \quad (15)$$

но в то же время и не столь значительной, чтобы зависимость $\nu_{Si}(\mu)$ можно было бы вообще игнорировать. В принципе $\nu_{Si}(\mu)$ можно было бы задать и в более общем виде (скажем, исходя из известной формулы для сечения резонансного рассеяния на квазидискретном уровне [13]), но

это привело бы к еще большему увеличению числа неизвестных параметров. Фактически (15) означает, что изменение μ отражается на величине частоты примесного рассеяния $\nu_{Si}(\mu)$ из-за изменения плотности состояний на виртуальном уровне примеси ϵ_f .

Формула (14) отражает различные вклады в свободную энергию сплава, связанные с изменением одноэлектронной энергии квазичастиц в поле объемной деформации матрицы хрома (слагаемое g_{Cr}) и в поле локальных деформаций вблизи примесей V (g_V) и Si ($g_{Si}(\mu)$) (напомним, что влияние примеси Mn учитывается нами в приближении жесткой зоны, т. е. только изменением μ (x_{Mn})). Зависимость $g_{Si}(\mu)$ связана с изменением заполнения виртуального уровня Si в Cr при деформации (в простейшем варианте —

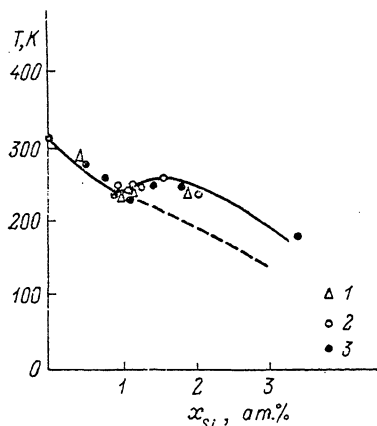


Рис. 4. Магнитная фазовая диаграмма бинарных сплавов Cr—Si.

Расчет: сплошная линия — с учетом стрикции и эффектов резонансного примесного рассеяния, штриховая — с учетом одних только стрикционных эффектов. Эксперимент: 1 — [4], 2 — [5], 3 — [6].

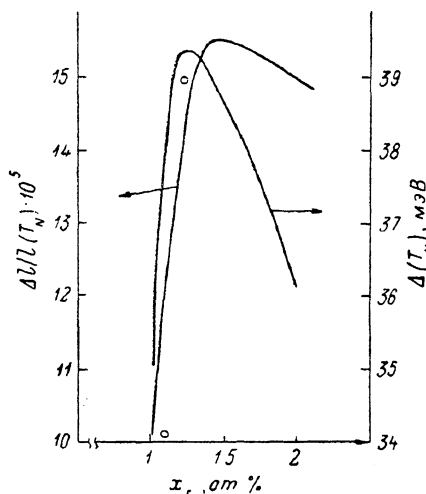


Рис. 5. Теоретические зависимости величины Δ и скачка Δ/l в T_N от концентрации кремния для бинарной системы.

просто с зависимостью положения энергии уровня ϵ_f от относительного изменения объема δ). Как и ранее, выбираем $g_{Si}(\mu)$ в простейшей форме

$$g_{Si}(\mu) = \begin{cases} g_0, & \mu \leq \mu^*, \\ g_0 - g_1(\mu - \mu^*), & \mu > \mu^*. \end{cases} \quad (16)$$

Часть коэффициентов в (12)—(14) известна из расчета фазовых диаграмм бинарных разбавленных сплавов Cr—V, Cr—Mn: $|\mu_{Mn}| = |\mu_V| = 20$ [мэВ/%], $|\mu_{Cr}| = 80.5$ [мэВ] [2, 8]. Остальные коэффициенты подбирались численно с целью возможно более детального совпадения теоретических и экспериментальных зависимостей $T_N(x_{Si})$ и $T_N(x_{Mn}, V)$ для бинарной и тройной систем сплавов: $|\mu_{Si}| = 12.3$ [мэВ/%], $\mu^* = -60.8$ [мэВ], $\nu_0 = 15.5$ [мэВ/%], $\nu_1 = 0.4$ [1/%], $\nu_V = 9$ [мэВ/%], $g_{Cr} = -0.4$, $g_V = -2.7$ [1/%], $g_0 = 0.65$ [1/%], $g_1 = 0.01$ [мэВ·%]⁻¹. Рассчитанные с этими параметрами зависимости $T_N(x_{Mn}, V)$ и $T_N(x_{Si})$ показаны на рис. 3, 4 сплошной линией. Экспериментальные данные для системы Cr—Si взяты из работ [4–6]. Рассчитанное в модели положение трикритической точки Θ (T_N^* , X_i^*) для системы Cr—Si соответствует значениям (240 К, 1 % Si). В тройной системе Cr—1.3 % Si— x % Mn(V) точка Θ появляется при легировании сплава ванадием и ее координаты (230 К, 1.3 % Si, 0.04 % V). Эти результаты с точностью 10–20 К согласуются как с нашими экспериментальными данными, так и данными работ [5, 6] для сплавов Cr—Si.

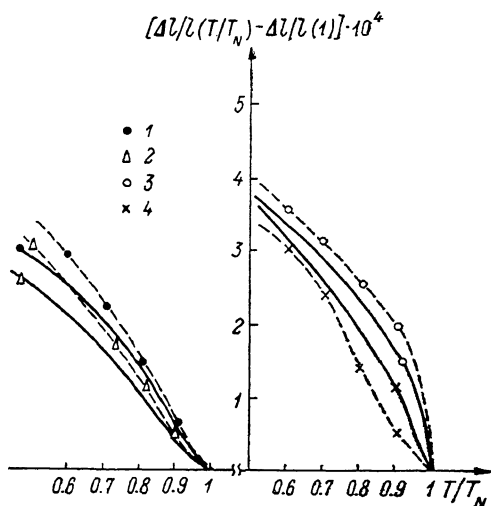
В рамках предложенной модели можно рассчитать зависимости $\Delta l/l(T)$ и $\Delta(T)$ вблизи T_N в AF_0 фазе. Минимизируя $F(\Delta, \mu)$ (6) по Δ и используя соотношение (10), получим

$$\frac{\Delta l}{l}(T) = \frac{1}{3} \frac{\Delta V}{V}(T) = \frac{1}{3} \cdot 10^{-4} \sqrt{\frac{1}{16} - G} \times$$

$$\times \left[\frac{\partial C_1}{\partial \mu} \Delta^2(T) + \left(\frac{\partial C_2}{\partial \mu} + 2G \frac{\partial C_1}{\partial \mu} \frac{\partial^2 C_1}{\partial \mu^2} \right) \Delta^4(T) \right],$$

$$\Delta^2(T) = (|C_2| + \sqrt{C_2^2 - 3C_1 C_3}) / 3C_3. \quad (17)$$

Результаты расчета скачков $\Delta l/l(T)$ и величины $\Delta(T)$ и при $T=T_N$ в зависимости от концентрации кремния для бинарной системы приведены на рис. 5. Экспериментальные данные работ [5, 6] нанесены точками. На рис. 6 показаны теоретические зависимости магнитострикционных вкладов для относительных изменений длины $[\Delta l/l(T/T_N) - \Delta l/l(1)]$ в сплавах Cr-1.3% Si-x% Mn (V) при $x_{Mn}=0.3$ (1), 0.47 (2) и $x_V=0$ (3), 0.04% (4). Штрихом обозначены соответствующие



на рис. 5. Экспериментальные данные работ [5, 6] нанесены точками. На рис. 6 показаны теоретические зависимости магнитострикционных вкладов для относительных изменений длины $[\Delta l/l(T/T_N) - \Delta l/l(1)]$ в сплавах Cr-1.3% Si-x% Mn (V) при $x_{Mn}=0.3$ (1), 0.47 (2) и $x_V=0$ (3), 0.04% (4). Штрихом обозначены соответствующие

Рис. 6. Изменение наклона зависимостей $\Delta l/l(T/T_N)$ в AF_0 фазе вблизи T_N при различных концентрациях Mn и V для тройной системы.

этим концентрациям экспериментальные величины, полученные вычитанием из полных изменений $\Delta l/l(T/T_N)$ скачков в T_N и нормального вклада, линейного по (T/T_N) . Последний, как предполагалось, имеет при $T/T_N < 1$ тот же наклон, что и в парамагнитной фазе, и совпадает с зависимостью $\Delta l/l(T/T_N)$ для Cr-1.3% Si-5% V.

3. Обсуждение

Расчеты показали, что учет стрикционных эффектов сам по себе довольно слабо влияет на величину T_N при переходе в AF_0 фазу ВСП (температуры перехода I и II рода отличаются друг от друга не более чем на 5 К). Доминирующим фактором, определяющим немонотонную зависимость $T_N(x_{Si})$ для бинарной системы и быстрое падение T_N с концентрацией V для тройных сплавов, является резонансное примесное рассеяние, сечение которого сильно зависит от положения μ относительно виртуального уровня ϵ_f . На рис. 4 штрихом показан расчет $T_N(x_{Si})$ с учетом одних только стрикционных эффектов: $\nu_{Si}(\mu) = \nu_1 = \text{const}$ при любых x_{Si} . Полученная зависимость имеет монотонный характер, как и в расчете [5]. Таким образом, учет резонансного характера частоты рассеяния $\nu(\mu)$ качественно меняет вид фазовой диаграммы $T_N(x_i)$.

По-видимому, в этом состоит причина немонотонности $T_N(x_i)$ в сплавах не только с Si, но и с другими *sp*-металлами (Al, Ge, Ga), фазовые диаграммы которых в AF_0 фазе не имеют первородных аномалий и качественно отличаются от обычно получаемых в расчетах, использующих стандартное представление о потенциальном характере электрон-примесного рассея-

ния. Если допустить, что в сплаве Cr—Al μ изначально находится выше ϵ_f , то с ростом концентрации Al, когда химический потенциал системы приближается к пику плотности состояний, рассеяние резко увеличивается, T_N быстро падает. При дальнейшем увеличении концентрации примеси ($x_{Al} \geq 2\%$ [14]) μ , пройдя пик плотности состояний, оказывается ниже ϵ_f , Al становится донорной примесью, резонансный характер рассеяния исчезает и T_N растет. В Cr—Ge и Cr—Ga резонансный уровень с самого начала расположен выше, чем μ , как и в Cr—Si. Заметим, что Ga и Ge являются примесями донорного типа, а их фазовые диаграммы напоминают диаграмму Cr—Si, только с более ярко выраженным максимумом $T_N(x_i)$.

Влияние стрикции сильно сказывается на величине скачка амплитуды ВСП $\Delta(T_N)$ в точке Нееля, а следовательно, и на скачке $\Delta l/l(T_N)$ (рис. 5). Заметим, что абсолютная величина скачка $\Delta l/l(T_N)$ для бинарных сплавов Cr—Si неоднозначно определяется из экспериментальных данных и сильно отличается у разных авторов. Например, для сплава, содержащего 1.2—1.3% Si, $\Delta l/l(T_N) \approx 35 \cdot 10^{-5}$ согласно нашим экспериментам и $\approx 15 \cdot 10^{-5}$ согласно [5]; по данным [6], при $x_{Si} \approx 1.42$ и 1.79% $\Delta l/l(T_N) \approx 37 \cdot 10^{-5}$. Полученные нами теоретические результаты хорошо согласуются вблизи трикритической точки с экспериментальными данными [5] по сплавам Cr—Si (рис. 5), а также удовлетворительно отражают изменение наклона $\Delta l/l(T)$ при изменении концентрации Mn или V для тройных сплавов в интервале 20—40 К вблизи $T_N \approx 230 \div 350$ К (рис. 6) (при дальнейшем понижении температуры перестает быть корректным разложением Гинзбурга—Ландау для $F(\Delta, \mu)$ и наш расчет теряет смысл).

Отметим также важный практический вывод, следующий из результатов расчета зависимости $\Delta l/l(T)$ вблизи T_N . Фактически по зависимостям $[\Delta l/l(T/T_N) - \Delta l/l(1)]$ можно предсказывать появление возможных инвариантных аномалий в некоторой температурной области ниже T_N . Подбирая наклон этих зависимостей равным наклону $\Delta l/l(T/T_N)$ в парамагнитной фазе, но с обратным знаком, можно отбирать сплавы по составам, для которых в небольшом температурном интервале полное тепловое расширение $\Delta l/l(T/T_N)_{полн} \approx 0$.

Заметим в заключение, что формальным ограничением применимости наших расчетов служит справедливость использования функционала Гинзбурга—Ландау, а это неизбежно включает требование о малости $|\Delta(T)| < \max\{\pi, T, \mu, \nu\}$. Таким образом, ни в случае перехода «сильного» первого рода, ни при $T \ll T_N$, когда указанный критерий может в принципе нарушаться, разложение $F(\Delta, \mu)$ по степеням Δ некорректно и необходимо прямое исследование полного микроскопического выражения для функционала свободной энергии. Эта задача связана с серьезными вычислительными трудностями и требует отдельного рассмотрения.

Список литературы

- [1] Куликов Н. И., Тугушев В. В. // УФН. 1984. Т. 144. № 4. С. 644—680.
- [2] Галкин В. Ю., Тугушев В. В., Тугушева Т. Е. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 8. С. 2290—2298.
- [3] Cable J. W. // J. Magn. Magn. Mater. 1977. V. 5. N 1. P. 112—115.
- [4] Benediktsson G., Hedman L., Åström H. U., Rao K. V. // J. Phys. F: Met. Phys. 1982. V. 12. N 7. P. 1439—1452.
- [5] Suzuki T. // J. Phys. Soc. Jap. 1977. V. 43. N 3. P. 869—874.
- [6] Alberts H. L., Lourens J. A. J. // J. Phys. F: Met. Phys. 1988. V. 18. N 1. P. 123—135.
- [7] Araj S., Katzenmeyer Wm. E. // J. Phys. Soc. Jap. 1967. V. 23. N 5. P. 932—936.
- [8] Nakanishi K., Kasuya T. // J. Phys. Soc. Jap. 1977. V. 42. N 3. P. 833—844.
- [9] Галкин В. Ю., Басаргин О. В., Тугушева Т. Е. и др. // Тез. докл. XVIII Всес. конф. по физике магнитных явлений. Калинин, 1988. С. 633—634.
- [10] Галкин В. Ю., Тугушева Т. Е., Басаргин О. В. и др. // Тез. докл. II Всес. семинара по магнитным фазовым переходам и критическим явлениям. Махачкала, 1989. С. 119—120.

- [11] Буздин А. И., Меньшов В. Н., Тугушев В. В. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 7. С. 2204—2219.
- [12] Arais S., Aidun R., Moyer C. A. // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. N 11. P. 5366—5368.
- [13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1974. § 134.
- [14] Alberts H. L., Lourens J. A. J. // Phys. Rev. B. 1984. V. B29. N 10. P. 5279—5285.

ЦНИИчермет
Москва

Поступило в Редакцию
1 февраля 1990 г.
