

УДК 538.114

© 1991

ОБ ОТНОШЕНИИ Δ/T_c В ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

Ю. П. Ирхин, Е. В. Розенфельд, А. А. Сивенцев

Рассматривается величина $\delta = \Delta_0/T_c$ (Δ_0 — обменная щель), играющая в ферромагнетиках такую же роль, как и в сверхпроводниках. В рамках модели Стонера и для гладкой функции плотности состояний получено, что δ меняется в пределах $(2\pi/\sqrt{3}, 2\pi)$. Этот результат хорошо совпадает со многими расчетными (по зонной теории) результатами, но сильно отличается от экспериментальных значений для Fe и Co ($\delta_{\text{эксп}} \approx 16$ и 9). Обсуждается вопрос об использовании δ в качестве критерия применимости одноэлектронной зонной теории и важности корреляционных эффектов в термодинамике магнетиков.

Хорошо известно, что существует аналогия между теориями сверхпроводимости и ферромагнетизма. В частности, соответствующие уравнения для намагниченности $M(T)$ и температурной зависимости сверхпроводящей щели $\Delta(T)$ оказываются очень близкими. Отношение $[2\Delta/T_c]$ очень широко обсуждается в физике сверхпроводимости как важнейший параметр, величина которого может определять доминирующий микроскопический механизм эффекта. Особенно возросло внимание к этому вопросу в связи с открытием ВТСП. В то же время смысл и значение величины Δ/T_c в физике ферромагнетизма до сих пор (насколько нам известно) не обсуждался.

В настоящей работе будет показано, что, хотя теория этого вопроса для ферромагнетизма несколько отличается от сверхпроводимости, величина Δ/T_c также может быть связана с важными микроскопическими параметрами ферромагнетика.

В теории сверхпроводимости в рамках приближений модели БКШ $2\Delta/T_c = 3.52$. Отклонение экспериментального значения от этой величины может служить мерой применимости модели БКШ к данному сверхпроводнику.

В ферромагнетиках, так же как и в сверхпроводниках, величина $\Delta(T=0)/T_c = \Delta_0/T_c$ определяется характером зависимости $\Delta(T)$, которая оказывается различной для существующих моделей ферромагнетизма, что как раз и представляет интерес при сравнении с экспериментом. Так, довольно очевидно, что Δ/T_c должны отличаться в моделях Гейзенберга и Стонера, что будет кратко обсуждено в количественной форме. Однако наибольший интерес представляет в настоящее время вопрос о роли флуктуаций в термодинамике магнетизма. Несмотря на большое количество работ, эта проблема еще остается нерешенной ввиду противоречивости оценок флуктуационных вкладов из различных эффектов (например, из намагниченности и теплоемкости). Недавно в работе [1] была предпринята попытка рассмотрения величины T_c/T_{sf} (T_{sf} — характерная температура спиновых флуктуаций) в качестве критерия для оценки вклада флуктуационного механизма. Нам представляется, что наряду с этим и в несколько другом аспекте отношение Δ/T_c также может быть использовано в качестве такового.

Наибольший интерес представляет величина Δ_0/T_c в модели коллективизированных электронов Стонера. В стонеровском магнетике аналогом сверхпроводящей щели является величина обменного расщепления электронных уровней для противоположных направлений спинов в молекулярном поле (МП), уравнение для которой удобно представить в этой модели в следующей форме [2]:

$$\Delta = \xi_+ - \xi_- = -2\mu_B \frac{\partial \varepsilon_{ex}}{\partial M}, \quad \varepsilon_{ex} = -\frac{1}{2} \alpha M^2, \quad \alpha = \frac{I}{\mu_B^2}. \quad (1)$$

Здесь $\Delta = \Delta(T)$ есть расщепление подполос со спинами вверх и вниз, ξ_+ и ξ_- — их химпотенциалы, α — коэффициент молекулярного поля, M — магнитный момент, I — обменный интеграл.

В дальнейшем рассмотрении играют важную роль среднее значение плотности состояний по интервалу энергий с однократным заполнением уровней

$$\langle g \rangle = \frac{1}{\Delta} \int d\varepsilon g(\varepsilon) [f(\varepsilon - \xi_+) - f(\varepsilon - \xi_-)] \quad (2)$$

и ее предел при $T \rightarrow T_c$ ($\Delta \rightarrow 0$)

$$\langle g \rangle_{T_c} = - \int d\varepsilon g(\varepsilon) \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{T=T_c}, \quad (3)$$

где $f(\varepsilon - \xi)$ — функция Ферми. Уравнение молекулярного поля и уравнение для T_c в этих обозначениях имеют вид

$$2I \langle g \rangle = 1, \quad 2I \langle g \rangle_{T_c} = 1, \quad (4)$$

причем первое из этих уравнений выполняется во всей области ферромагнетизма $T < T_c$.

Для того чтобы обобщить рассмотрение и на парамагнитную область, следует ввести помимо ξ_+ и ξ_- парамагнитный химпотенциал ξ_p , определяемый при $\Delta=0$. Величина ξ_p может быть использована и в ферромагнитной области при $T < T_c$; с ее помощью можно ввести аналогично (3) среднее значение $\langle g \rangle_T$ при произвольной температуре

$$\langle g \rangle_T = - \int d\varepsilon g(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon - \xi_p)}{\partial \varepsilon}. \quad (5)$$

Парамагнитная восприимчивость χ_0 вычисляется тогда по формуле

$$\chi_0 = 2\mu_B^2 \langle g \rangle_T, \quad (6)$$

так что вместо уравнений (4) будем иметь условие ферромагнетизма Стонера в обычной форме и уравнение для парамагнитной температуры Кюри, которая в теории МП совпадает с T_c

$$2I \langle g \rangle_T \geq 1, \quad \alpha \chi_0(T_c) = 1. \quad (7)$$

Если обозначить ξ_p при $T=0$ через ε_F , а $g(\varepsilon_F) = g_F$, то величина $\langle g \rangle_T$ с ростом температуры от 0 до T_c падает от g_F до $(2I)^{-1}$. При этом изменение парамагнитной восприимчивости будет

$$\chi_0(0) - \chi_0(T_c) = (1/\alpha)(2I g_F - 1). \quad (8)$$

Отсюда следует, что величина T_c в модели Стонера определяется двумя факторами: 1) величиной $2I g_F - 1$; 2) быстротой уменьшения $\chi_0(T)$ (или, что то же самое, $\langle g \rangle_T$) с ростом температуры.

Вид функции $\chi_0(T)$ определяется видом $g(\varepsilon)$. Чем резче зависимость $g(\varepsilon)$ вблизи ε_F (например, при существовании острого пика), тем быстрее обычно спадает χ_0 с T_c .

Легко видеть, что теми же факторами определяется и величина щели Δ . Действительно, из (2) и (4) следует, что при $T=0$

$$\frac{1}{\Delta_0} \int_{\Delta_0} d\varepsilon g(\varepsilon) = \frac{1}{2I}. \quad (9)$$

Отсюда видно, что Δ_0 должно быть тем больше, чем больше величина $2Ig-1$, и тем меньше, чем резче зависимость $g(\varepsilon)$ вблизи ε_F . Что же касается отношения Δ_0/T_c , то его величина должна быть достаточно стабильной.

Для подтверждения этого рассуждения рассмотрим некоторые типы зависимостей $g(\varepsilon)$.

В простейшем случае гладкой плотности состояний, оставляя члены до второго порядка в разложении $g(\varepsilon)$ по $\varepsilon - \varepsilon_F$

$$g(\varepsilon) = g_F + g'_F(\varepsilon - \varepsilon_F) + \frac{1}{2} g''_F(\varepsilon - \varepsilon_F)^2, \quad (10)$$

$$\frac{|g(\varepsilon_F \pm \pi T_c) - g_F|}{g_F} \sim \frac{|g(\varepsilon_F \pm \Delta_0/2) - g_F|}{g_F} \ll 1,$$

получаем

$$\delta = \frac{\Delta_0}{T_c} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left[\frac{(g'_F/g_F)^2 - g''_F/(3g_F)}{(g'_F/g_F)^2 - g''_F/g_F} \right]^{1/2}. \quad (11)$$

Как известно [3], при $g''_F > 0$ в модели Стонера может возникнуть неустойчивость ферромагнитного состояния. Ограничиваясь поэтому рассмотрением выпуклых ($g''_F < 0$) кривых $g(\varepsilon)$, приходим к выводу, что δ изменяется в пределах

$$3.62 \approx 2\pi/\sqrt{3} \leq \delta \leq 2\pi. \quad (12)$$

Подчеркнем, что в обоих предельных случаях $g''_F=0$ (линейный склон) и $g''_F=0$ (параболический, наполовину заполненный пик) формула (11) является точной.

В каких случаях δ может выйти за пределы (12)? Если ε_F лежит на вогнутом участке $g(\varepsilon)$ ($g''_F < 0$), но основное состояние ферромагнитно, δ может стать меньше $2\pi/\sqrt{3}$.

Другим случаем является выход за рамки соотношения (10). Так, при достаточно плоской вершине пика $g(\varepsilon)$, на котором лежит ε_F , δ может стать неограниченно большим. Действительно, пусть в отличие от (10)

$$g(\varepsilon) = g_F - \gamma |\varepsilon|^m, \quad \gamma > 0, \quad \varepsilon_F = 0. \quad (13)$$

Тогда при $m > 1$ и достаточно малых $2Ig_F-1$ (так, чтобы не давали вкладов области с отрицательными $g(\varepsilon)$ в (13)), получаем

$$\delta = 2\sqrt{2(m+1)! (1-2^{1-m}) \zeta(m)} \quad (14)$$

($\zeta(m)$ — дзета-функция Римана). При $m=1$ (острый пик с линейными склонами) $\delta = 8 \ln 2 \approx 5.55$.

Отношение δ медленно, но неограниченно растет с m : при $m=4$ оно составляет ≈ 7.8 , при $m=8$ — ≈ 10.8 , при $m=11$ — ≈ 13.1 и т. д. Подчеркнем, что снова отношение это не зависит от обменной энергии и определяется лишь видом кривой $g(\varepsilon)$.¹

¹ Этот вывод неверен при больших I , когда наступает насыщение ферромагнетика. Так, для наполовину заполненного прямоугольного пика в насыщенном состоянии

$$\frac{\Delta_0}{T_c} = -4Ig_F \ln \frac{2Ig_F - 1}{4Ig_F}.$$

Таким образом, в рамках классической модели Стонера с большой вероятностью отношение δ лежит в пределах соотношения (12). Выход его значения за эти рамки может быть связан либо со специфическим видом зависимости $g(\varepsilon)$ вблизи ε_F , либо с несправедливостью простейшего приближения молекулярного поля.

Учет отклонений от модели МП в формальных рамках модели Стонера не представляет труда — для этого в разложении обменной энергии (10) достаточно учесть более высокие степени $\varepsilon - \varepsilon_F$. Именно к такому результату приводит, например, учет спиновых флуктуаций в методике Шмицу [2]. Возникнут такие члены и при учете зависимости от намагниченности плотностей состояний подполос [4]. По оценке этой работы величина членов, содержащих высшие степени M , может достигать нескольких процентов от первого слагаемого.

Ясно, что эффективно все эти возможности можно учесть введением зависимости I от M , а следовательно, и от T . Встает, естественно, вопрос: в каких случаях появление такой зависимости играет главную роль и в каких приводит лишь к слабым отклонениям от теории МП?

Для ответа на этот вопрос перепишем (8) с учетом зависимости $I(T)$

$$\chi_0(0) - \chi_0(T_c) = \alpha(0)^{-1} \left(2I(0)g_F - \frac{I(0)}{I(T_c)} \right). \quad (15)$$

Отсюда видно, что возникновение слабой зависимости $I(T)$ может привести к существенным изменениям T_c (а с ней и отношения Δ_0/T_c , если считать $I(0)$ неизменным) только в случае, когда $2I(0)g_F$ близко к 1. Наиболее сильные изменения T_c при этом будут происходить в магнетиках с гладкой зависимостью $g(\varepsilon)$ вблизи ε_F ; в этом случае $\chi_0(0) - \chi_0(T_c)$ пропорционально T^2 (а, возможно, и более высокой степени T) и

$$T_c \sim \sqrt{2I(0)g_F - \frac{I(0)}{I(T_c)}}, \quad (16)$$

а Δ_0 по-прежнему определяется (9). Благодаря наличию корневой особенности функции (16) даже слабая зависимость $I(T)$ может привести к значительному возрастанию δ .

При наличии на $g(\varepsilon)$ особенности вблизи ε_F $\chi_0(0) - \chi_0(T_c) \sim T$ и T_c гораздо слабее — линейно зависит от правой части (15). Таким образом, как уже указывалось в [5], наличие особенностей $g(\varepsilon)$ вблизи ε_F ослабляет влияние спиновых флуктуаций на температуру Кюри и δ .

В некоторых отношениях также представляет интерес рассмотрение величины δ в модели Гейзенберга. По аналогии с моделью Стонера в приближении МП в этом случае естественно понимать под Δ_0 обменную энергию в расчете на один узел (или, возможно, на один спин). В расчете на узел имеем

$$\Delta_0 = 2ZS^2I, \quad T_c = \frac{2}{3}ZIS(S+1), \quad (17)$$

$$\delta = 3S/(S+1). \quad (18)$$

Здесь Z — число ближайших соседей, S — величина спина на узле, I — обменный интеграл. (Если под Δ_0 понимать энергию на спин, δ станет меньше в S раз).

Таким образом, δ в модели Гейзенберга зависит только от величины спина и лежит в пределах

$$1 \leq \delta \leq 3, \quad 1/2 \leq S < \infty. \quad (19)$$

В более точных приближениях (например, типа Бете—Пайерлса) зависимость обменной энергии от T становится отличной от приближения молекулярного поля, что приводит к изменению результатов (17)—(19).

Степень точности различных приближений может быть установлена путем сравнения с экспериментом, в котором величина Δ_0 измеряется при низких температурах (в пределе $T \rightarrow 0$). В качестве таких измерений могут быть использованы магнитная теплоемкость спиновых волн и неупругое рассеяние нейтронов на спиновых волнах, а также спиновая поляризация в различных спектральных методиках. При этом в литературе вместо отношения Δ_0/T_c обычно рассматривают величину I/T_c . Последняя оказывается заметно меньше теоретического значения $3/(2ZS(S+1))$ (приближение МП) и соответствующего значения метода Бете—Пайерлса 0.552, что указывает на более медленное спадание $\Delta(T)$ с температурой, чем предсказывает теория. К сожалению, имеется достаточно большой разброс экспериментальных данных различных авторов и разных методик. В частности, для немагнитических магнетиков сильно отличаются значения I , определенные из теплоемкости [6] и неупругого рассеяния нейтронов [7]. Это не позволяет в настоящее время провести надежное сравнение теории с экспериментом. Здесь мы хотели бы отметить, что величина Δ_0/T_c больше подходит для такого сравнения, чем I/T_c , поскольку она не зависит от Z , сравнительно слабо зависит от S и ограничена удобным интервалом значений.

2. Отношение Δ_0/T_c как критерий существования особенностей плотности состояний и величины спин-флуктуационного вклада в термодинамику ферромагнетика

Возможности сравнения Δ_0/T_c с экспериментом для модели Гейзенберга уже обсуждались в разделе 1. Здесь мы рассмотрим более актуальную проблему, имеющую место в рамках модели коллективизированных электронов, — соотношение между приближением молекулярного поля и спин-флуктуационными теориями.

Этот вопрос недавно обсуждался Моном и Вольфартом [1], которые ввели характерную температуру спиновых флуктуаций и ее отношение к стонеровской температуре Кюри как меру влияния спиновых флуктуаций на термодинамические характеристики магнетика. Представляет несомненный интерес сравнение обоих критериев между собой и с экспериментом.

	Fe	Co	Ni
$\Delta^{(1)}$ [8]	2	1.54	0.58
$\Delta^{(2)}$ [12]	1.41	1.11	0.38
$\Delta^{(3)}$ [2] эВ	1.3	0.97	0.31
$\Delta_0^{(4)}$ [10]	1.5	1.1	0.3
$T_c^{(1)}$	5300	4000	2900
$T_c^{(2)}$	2560	2240	1790
$T_c^{(3)}$, К	1040	1390	630
$T_c^{(4)}$	1040	1390	630
$\delta^{(1)}$	4.38	4.47	2.32
$\delta^{(2)}$	6.39	5.75	2.46
$\delta^{(3)}$	14.5	8.09	5.7
$\delta_0^{(4)}$	16.7	9.16	5.5

В таблице представлены данные по величинам Δ_0 , T_c и δ для Fe, Co и Ni, полученные из различных теоретических расчетов, а также их экспериментальные значения Δ_0 , T_c^0 и δ_0 .

Наибольшую величину имеют $\Delta^{(1)}$, взятые из работы Гуннарсона [8] и соответствующие очень большим значениям $T_c^{(1)}$. Значения $\Delta^{(2)}$ и $T_c^{(2)}$ (данные по [1]), полученные Олесом и Столхофом, заметно меньше за счет учета зависимости от намагниченности обменно-корреляционной энер-

гии E_{exc} . Однако величины $T_c^{(2)}$ все еще остаются значительно больше экспериментальных. Наконец, данные $\Delta^{(3)}$ и $T_c^{(3)}$ взяты из обзора Шмицу [2], который для случая Ni использовал полуэмпирическую плотность состояний, полученную с привлечением экспериментальных данных по электронной теплоемкости, и подбирает Δ_0 и $\alpha(T)$ из требований совпадения значений магнитного момента и T_c с экспериментом. Интересно отметить, что при этом в Ni $\alpha(T)$ менялось довольно мало в интервале от 0 до T_c ($0.78 \leq \alpha_{\text{Ni}}(T) \leq 0.82 \cdot 10^4$ моль/эме). В то же время для Fe и Co, где Шмицу использовал расчетные плотности состояний, было необходимо менять $\alpha(T)$ значительно сильнее ($0.9 \leq \alpha_{\text{Fe}}(T) \leq 1.4$, $0.87 \leq \alpha_{\text{Co}}(T) \leq 1.25 \cdot 10^4$ моль/эме), чтобы достичь совпадения T_c с экспериментом. Такое отличие в поведении Ni, с одной стороны, и Fe и Co — с другой, указывает на возможность описания температурной зависимости намагниченности Ni в рамках модели Стонера (в приближении МП) с расчетными значениями параметров Δ и α в противоположность Fe и Co, где необходимо добавочно задавать сильную зависимость $\alpha(T)$. Этот вывод в отношении Ni подтверждается также результатами работ [4, 5, 9] по парамагнитной восприимчивости и намагниченности Ni, в которых удалось получить согласие теории с экспериментом без учета спиновых флуктуаций, но с учетом влияния острого пика в плотности состояний Ni вблизи уровня Ферми.

Экспериментальное значение Δ_0 в таблице взято нами по данным фотоэмиссии с угловым разрешением [10]. Существует также большое число работ по определению коэффициента жесткости спиновых волн D из неупругого рассеяния нейтронов. Однако для модели коллективизированных электронов (в отличие от модели Гейзенберга) отсутствует простая связь Δ с D , что затрудняет использование этих работ. Что же касается методики определения Δ из низкотемпературной теплоемкости спиновых волн, то в отличие от неметаллов последняя очень мала по сравнению с электронной теплоемкостью, что не позволяет получить для нее сколь угодно надежные данные.

Теоретические значения Δ в общем отражают экспериментальную ситуацию и примерно совпадают со значениями $\Delta_{\text{Ni}} = 0.35 \pm 0.5$ и $\Delta_{\text{Fe}} = 1.4 \pm \pm 0.2$ эВ, полученными в работе Вольфарта [11] при рассмотрении различных результатов, имевшихся в литературе еще к 1964 г. Любопытно отметить при этом, что результаты Гуннарсона [8], проводившего более точные самосогласованные вычисления в LSDA методике с учетом температурного фермиевского размытия, наиболее сильно отличаются от эксперимента.

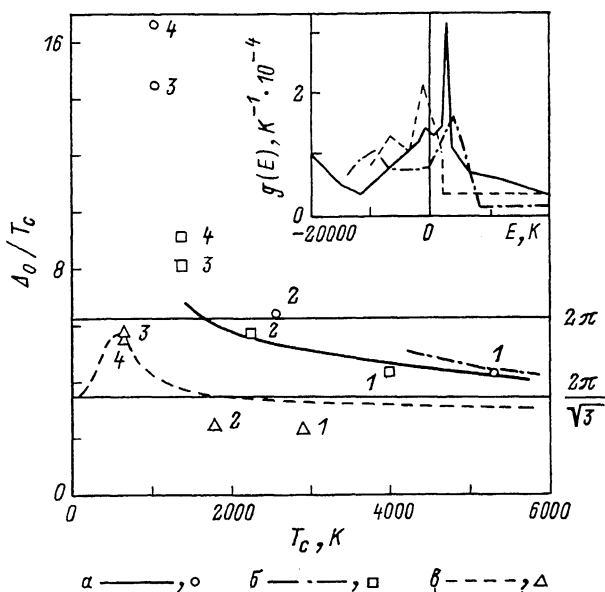
Из таблицы видно, что расчетное отношение Δ/T_c имеет величину $\sim 4 \div 6$ для Fe и Co, которая лежит внутри предсказываемого теорией интервала. Наоборот, $(\Delta_0/T_c)_0$ значительно превосходит теоретические значения для Fe и Co и только для случая Ni согласуется с (12). Следует отметить, что в последнем случае Δ и T_c сильно отличаются от соответствующих экспериментальных значений, но их отношения оказываются одинаковыми.

Расчетные значения $\delta_{\text{Ni}} \approx 2.3$ не попадают в интервал значений (12). Это, по-видимому, связано с тем, что в работе [8] T_c вычислялось с добавочным учетом влияния температурного размытия функции распределения Ферми на плотность состояний, не учитываемого в методе МП в теории Стонера. Для относительно гладких плотностей состояний (как в Fe и Co) это не играет большой роли. Однако в Ni (где большой пик лежит вблизи ϵ_F) среднее значение $g(\epsilon)$ по интервалу kT (с учетом сдвига химпотенциала) может более сильно зависеть от температуры, изменяя добавочно величину Δ/T_c . То же можно сказать и о работе [12], в которой введенное авторами приближение для обменно-корреляционной энергии выходит за рамки молекулярного поля (авторы получили сильное уменьшение обменного интеграла за счет корреляций).

На рисунке приведены зависимости δ от T_c , вычисленные с использованием классической модели Стонера для Fe, Co и Ni (плотности состояний взяты из работ [2, 13]). Значения Δ_0 и T_c определялись из (4) через значе-

ния I . Последние в соответствии с критерием ферромагнетизма Стонера брались в интервале $I > (2g_F)^{-1}$. При этом в Fe и Co, где в отличие от Ni из-за своеобразной структуры $g(\epsilon)$ вблизи ϵ_F на зависимости $\chi_0(T)$ имеется максимум, возможно существование двух и более решений уравнения (11) для T_c (это связано, по-видимому, с уже упоминавшейся выше возможностью неустойчивости ферромагнитного состояния при $g_F'' > 0$). Решение становится единственным лишь при достаточно больших I (а, следовательно, и T_c), и именно в этой области изображены на рисунке кривые для Fe и Co.

Можно назвать две наиболее вероятные причины расхождения зонной теории с экспериментом: 1) неправильное вычисление плотности состояний для основного состояния ($T=0$) (вследствие неприменимости одно-



Зависимость δ от T_c , полученная при расчете с изменяющейся величиной обменного интеграла.

Точками обозначены результаты из работ [1] (1), [12] (2), [2] (3), [10] (4), соответствующие данным таблицы, а линиями — результат настоящей работы для Fe (а), Co (б) и Ni (в). На вставке соответствующими линиями изображены использованные в расчете плотности состояний на основе данных [2, 12] ($\epsilon_F=0$).

электронной теории к переходным металлам); 2) неправильное вычисление температурной зависимости магнитных свойств из-за неучета эффектов корреляции для конечной температуры (при правильном основном состоянии).

Полученные здесь результаты для Δ_0/T_c показывают, что для Fe и Co несомненно важны корреляционные температурные эффекты, в то время как для Ni (в случае расчетов с большими значениями Δ_0), по-видимому, существенна первая из указанных причин. Такой вывод в общем согласуется с имеющимися представлениями, основанными на других соображениях, в частности, связанных с теорией спиновых флуктуаций. В рамках последней величина T_c сильно понижается при неизменном значении Δ_0 , что приводит к более быстрому падению намагниченности с температурой и соответствующему увеличению Δ_0/T_c . Этот механизм может играть важную роль в Fe и Co, в то время как в Ni он дает значительно меньший ($\sim 15 \div 20\%$) вклад в температурную зависимость намагниченности [4, 9]. В то же время, согласно данным работы [1], величина Δ_0 в Ni (а также ширина d -полосы), значительно завышена в сравнении с экспериментом.

В отношении Ni наш результат расходится с работой [1], где авторы, используя значения Δ_0 и T_c из работ [8, 12] и основываясь на сравнении

введенной ими характерной температуры флуктуаций со стонеровской температурой Кюри, делают вывод, что в Ni, так же как и в Fe, имеют место сильные флуктуации, в то время как Co является стонеровским магнетиком.

Следует, однако, заметить, что, как показано в [4], Ni характеризуется (в связи с наличием пика $g(\epsilon)$) сильной зависимостью расчетных значений Δ_0 и T_c от значения намагниченности M_0 . Изменяя последнюю на величину $\sim 10^{-2}$ μ_B , можно получить Δ_0 и T_c , значительно меньше, чем в теоретических расчетах [8, 12], и совпадающие с экспериментом. Такие же результаты имеются и в обзоре [2]. Кроме того, те же самые значения Δ_0 и T_c можно получить при небольших изменениях формы плотности состояний в пределах той точности, с которой она вычисляется (чего нельзя сделать для Fe и Co).

При таком подходе мы видим, что как раз Ni ближе всего подходит к стонеровскому типу магнетика. То же видно из таблицы, где значения Δ_0/T_c (как теоретические, так и экспериментальные) для Ni значительно отличаются от близких друг к другу значений Fe и Co, а экспериментальное δ для Ni попадает в теоретический интервал формулы (9).

Таким образом, мы видим, что по критерию Δ_0/T_c , физический смысл которого заключается в степени соответствия температурной зависимости $\Delta(T)$ приближению МП, Ni оказывается близким к стонеровскому типу магнетика в отличие от выводов работы [1], основанных на величине отношения T_c^*/T_{sf} . Последнее может оказаться неустойчивым при небольших изменениях плотности состояний в пределах точности ее вычисления. Кроме того, не очень ясны пределы справедливости оценочной формулы $T_{sf} = M_0/10k_B\chi_0$, используемой авторами [1].

Список литературы

- [1] Mohn P., Wohlfarth E. P. // J. Phys. F. 1987. V. 17. P. 2421.
- [2] Shimizu M. // Rep. Prog. Phys. 1981. V. 44. P. 329.
- [3] Гребенников В. И. // ФММ. 1988. Т. 65. С. 691.
- [4] Сивенцев А. А., Ирхин Ю. П., Розенфельд Е. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. С. 6.
- [5] Irkhin Yu. P., Rosenfeld E. V. // Solid State Comm. 1982. V. 44. P. 1371.
- [6] Kouvel J. S. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1489; Dixon M., Hoarse F. E. // Phys. Lett. 1965. V. 14. P. 184.
- [7] Watanabe H., Brockhause B. N. // Phys. Lett. 1962. V. 1. P. 189.
- [8] Gunnarson O. // J. Phys. F. 1976. V. 6. P. 587.
- [9] Irkhin Yu. P., Rosenfeld E. V. // JMMM. 1985. V. 51. P. 165.
- [10] Eastman D. E., Himpsel F. J., Knapp J. A. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. P. 95.
- [11] Wohlfarth E. P. // Proc. Int. Conf. Magn. Nottingham, 1964. P. 51.
- [12] Oles A. M., Stollhoff G. // JMMM. 1986. V. 54—57. P. 1045.
- [13] Moruzzi V. L., Janak J. F., Williams A. R. Calculated electronic properties of metals. N. Y.: Pergamon Press, 1978.

Институт физики металлов АН СССР УрО
Свердловск

Поступило в Редакцию
22 октября 1990 г.