

05
Теория эффективного поля для разупорядоченных магнитных сплавов

© Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова

НИЦ „Курчатовский институт“,
 Москва, Россия

E-mail: meilikhov@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 25 сентября 2013 г.)

Разупорядоченные сплавы магнитных атомов двух сортов рассматриваются в рамках модели Изинга, основанной на расчете и анализе функции распределения эффективных полей, действующих на магнитные атомы. Рассчитаны температуры Кюри, намагниченности двух магнитных „подрешеток“, пороговые концентрации магнитных атомов и магнитные фазовые диаграммы сплавов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-02-00550а.

1. Введение

Известно, что разбавление магнитных материалов другими магнитными или немагнитными атомами изменяет свойства сплава (магнитную восприимчивость, теплоемкость, температуру Кюри и др.) [1]. Общая черта всех таких систем — случайное распределение примесей по узлам исходной решетки. Традиционная теория среднего поля неадекватно описывает свойства такой разупорядоченной системы взаимодействующих магнитных моментов. Цель настоящей работы — показать, что разупорядоченные сплавы, состоящие из двух различных магнитных атомов, хорошо описываются теорией эффективного поля, предложенной ранее для описания системы магнитных атомов одного сорта [2].

Мы ограничимся изинговским приближением, в котором атомные магнитные моменты двух возможных (противоположных) направлений взаимодействуют только со своими ближайшими соседями. Хотя даже для регулярных трехмерных систем такого рода нет точного решения, имеются приближенные, но достаточно точные соотношения для температуры Кюри простой кубической и объемно центрированной кубической решетки [3,4]: $k_B T_C \approx 4.5J$ и $k_B T_C \approx 6.37J$ соответственно, где J — энергия взаимодействия ближайших соседей. Сравнивая эти значения с результатами теории среднего поля $k_B T_C = zJ$ (z — число ближайших соседей), т.е. $k_B T_C = 6J$ и $k_B T_C = 8J$ соответственно, замечаем, что среднеполевые результаты существенно отличаются от „точных“. Кроме известного дефекта среднеполевой теории, не учитывающей корреляции магнитных моментов, дополнительная ошибка этой модели состоит в том, что она предполагает эквивалентность всех узлов решетки. Это выражается в том обстоятельстве, что среднее поле, предполагаемое одинаковым во всех узлах, на самом деле меняется от узла к узлу. В связи с этим естественно учесть эту хаотичность путем введения некоторого эффективного поля и посмотреть, повышается ли точность получаемого при этом решения. Такое приближение было впервые использовано в [5] при рассмотрении

системы случайно распределенных магнитных диполей. Позже оно интенсивно анализировалось в серии статей [6], где основным элементом была предложенная безо всяких обоснований функция распределения энергий парного взаимодействия. Суть такой модели состоит в замещении уравнения стандартной среднеполевой модели

$$j = \text{th} \left(\frac{\lambda j}{k_B T} \right) \tag{1}$$

(где j — приведенная намагниченность системы, λ — постоянная среднего поля) его обобщенным аналогом

$$j = \int_{-\infty}^{\infty} \text{th} \left(\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T} \right) F(j; H_{\text{eff}}) dH_{\text{eff}}. \tag{2}$$

Здесь $F(j; H_{\text{eff}})$ — функция распределения локальных эффективных магнитных полей H_{eff} (измеренных в энергетических единицах). Эти поля генерируются в случайной системе магнитных моментов с намагниченностью j в точке расположения одного из них всеми другими соседними моментами. Очевидно, при расчете функции распределения было бы более правильно исходить из пространственной зависимости энергии парного взаимодействия $W(r)$, а не из некоторой принудительно задаваемой функции распределения (как это было сделано в [6]). Заметим, что среднеполевое уравнение (1) эквивалентно уравнению

$$j = \text{th} \left[\frac{\bar{H}(j)}{k_B T} \right], \tag{3}$$

где $\bar{H}(j) = \int_{-\infty}^{\infty} H_{\text{eff}} F(j; H_{\text{eff}}) dH_{\text{eff}}$.

Для кубических решеток (ssc, bcc и fcc), рассматриваемых в рамках изинговской модели, функции распределения $F(j; H_{\text{eff}})$ найдены точно [7]. Это позволяет исследовать магнитные свойства таких систем с помощью уравнения (2).¹ Подобное приближение использовалось

¹ Другие подходы к решению этой задачи и подробную библиографию см. в [8–10].

в [11–13], но во всех этих работах рассматривались системы с одним типом магнитных атомов. В настоящей работе этот подход распространяется на системы двух взаимодействующих типов атомов и рассчитывается намагниченность обеих разупорядоченных магнитных подрешеток.

2. Случайная кубическая решетка с двумя типами атомов

Хотя формально теория эффективного поля позволяет учесть дальнедействующие взаимодействия, мы учитываем здесь только взаимодействие между ближайшими соседями, что достаточно для описания свойств различных металлических сплавов. Для определенности рассмотрим кубическую бсс-решетку (например, решетку α -Fe), узлы которой случайно заняты магнитными атомами двух типов, которые будем обозначать символами и/или индексами F (для атомов матрицы, например Fe) и M (для примесей, например Mn).

Гамильтониан, описывающий систему, имеет вид

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad S_i, S_j = \pm 1, \quad (4)$$

где $i, j = F, M$; J_{ij} — энергии взаимодействия двух соответствующих соседних F - и M -атомов.

Рассмотрим сначала конфигурацию атомов (общим числом 8 для бсс-решетки) вблизи данного „центрального“ атома, например атома Fe с магнитным моментом, направленным „вверх“ (рис. 1). Если атомная концентрация M -примесей равна q , то вероятность $p_q(n)$ иметь $8 - n$ F -атомов и n M -атомов по соседству с центральным F -атомом равна

$$p_q(n) = C_{8-n}^{8-n} (1-q)^{8-n} q^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, 8. \quad (5)$$

Какая часть этих $8 - n$ F -атомов и n M -атомов имеет магнитные моменты, ориентированные „вверх“ и „вниз“, зависит от степеней j_F и j_M спиновой поляризации F - и M -„подрешеток“. В частности, вероятность $p_F(n, k)$ того, что $8 - n - k$ F -атомов (из всех $8 - n$ рассматриваемых F -атомов) имеет магнитные моменты, направленные „вверх“, а k оставшихся F -атомов имеют моменты, направленные „вниз“, равна

$$p_F(n, k) = C_{8-n}^k \left(\frac{1+j_F}{2} \right)^{8-n-k} \left(\frac{1-j_F}{2} \right)^k, \quad k = 0, 1, \dots, 8-n. \quad (6)$$

Наконец, вероятность $p_M(n, k, i)$ того, что $n - i$ M -атомов (из всех n рассматриваемых M -атомов) имеют магнитные моменты, направленные „вверх“, а i оставшихся M -атомов — моменты, направленные „вниз“, равна

$$p_M(n, k, i) = C_n^i \left(\frac{1+j_M}{2} \right)^{n-i} \left(\frac{1-j_M}{2} \right)^i, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (7)$$

Следовательно, вероятность $P(n, k, i, j_F, j_M)$ конфигурации с $8 - n$ F -атомами и n M -атомами (по соседству

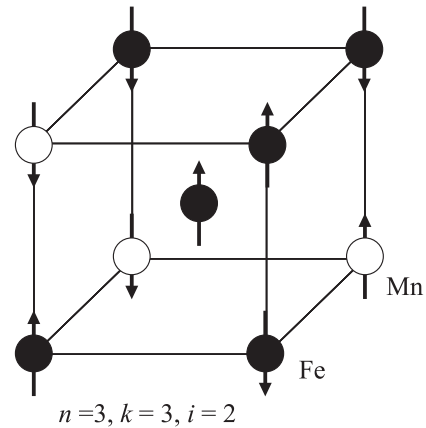


Рис. 1. Пример атомной конфигурации ($n = 3, k = 3, i = 2$) атомов Fe и Mn в бсс-решетке. В центре — атом Fe с магнитным моментом, направленным „вверх“.

с центральным F -атомом, имеющим магнитный момент „вверх“, из которых $k \leq 8 - n$ F -атомов имеют моменты, направленные „вниз“, равна

$$P(n, k, i, j_F, j_M) = p_q(n) p_F(n, k) p_M(n, k, i) = \frac{1}{256} C_8^{8-n} (1-q)^{8-n} q^n C_{8-n}^k (1+j_F)^{8-n-k} (1-j_F)^k \times C_n^i (1+j_M)^{n-i} (1-j_M)^i. \quad (8)$$

Обменное взаимодействие между F - и M -атомами можно описать эффективными полями J_{FF} и J_{FM} (т.е. энергиями взаимодействия), знаки которых зависят от типа взаимодействия (ферро- или антиферромагнитное) и взаимной ориентации магнитных моментов взаимодействующих атомов. Заметим, что ферромагнитному взаимодействию соответствуют положительные значения J_{FF}, J_{FM} , а антиферромагнитному — отрицательные значения J_{FF}, J_{FM} . В рассматриваемой конфигурации суммарное эффективное магнитное поле на центральном F -атоме есть

$$H_F(n, k, i) = (8 - n - 2k) J_{FF} + (n - 2i) J_{FM}$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots, 8; k = 0, 1, \dots, 8 - n; i = 0, 1, \dots, n). \quad (9)$$

При $|J_{FM}/J_{FF}| \ll 1$ соответствующий спектр энергий взаимодействия центрального F -атома для различных конфигураций соседних атомов напоминает колебательно-вращательные спектры молекул с удаленными колебательными уровнями, окруженными близко расположенными вращательными уровнями. В этом случае мессбауэровские спектры, измеряющие поля $H_F(n, k, i)$ на атомах Fe [14], дают непосредственную возможность оценить величину J_{FF} . Оказывается, что в α -Fe $J_{FF} \approx 24$ кОе.

Функция распределения энергий взаимодействия есть

$$F(j_F, j_M; H_{\text{eff}}) = \frac{1}{256} \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \sum_{i=0}^n C_8^{8-n} (1-q)^{8-n} q^n \times C_{8-n}^k (1+j_F)^{8-n-k} (1-j_F)^k \times C_n^i (1+j_M)^{n-i} (1-j_M)^i \delta[H_{\text{eff}} - H_F(n, k, i)], \quad (10)$$

где $\delta(x - x_0)$ — δ -функция Дирака, отличная от нуля только при $x = x_0$.

Подставляя ее в соотношение (2), находим уравнение эффективного поля

$$j_F = \frac{1}{256} \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \sum_{i=0}^n C_8^{8-n} (1-q)^{8-n} q^n \times C_{8-n}^k (1+j_F)^{8-n-k} (1-j_F)^k \times C_n^i (1+j_M)^{n-i} (1-j_M)^i \text{th}[H_F(n, k, i)/k_B T], \quad (11)$$

определяющее поляризацию системы F -атомов. Аналогично можно получить уравнение эффективного поля

$$j_M = \frac{1}{256} \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \sum_{i=0}^n C_8^{8-n} q^n (1-q)^{8-n} \times C_{8-n}^k (1+j_F)^{8-n-k} (1-j_F)^k \times C_n^i (1+j_M)^{n-i} (1-j_M)^i \text{th}[H_M(n, k, i)/k_B T], \quad (12)$$

определяющее поляризацию M -атомов, где эффективное поле

$$H_M(n, k, i) = (8 - n - 2k)J_{FM} + (n - 2i)J_{MM} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 8; k = 0, 1, \dots, 8 - n; i = 0, 1, \dots, n) \quad (13)$$

на данном M -атоме получается из (9) заменой $J_{FF} \rightarrow J_{FM}$, $J_{FM} \rightarrow J_{MM}$. Заметим, что приведенные намагниченности m_F , m_M F - и M -атомов определяются соотношениями $m_F = (1 - q)j_F$, $m_M = qj_M$.

Средняя энергия взаимодействия на один F -атом равна

$$W_F(j_F, j_M) = - \int_{-\infty}^{\infty} F(j_F, j_M, H_{\text{eff}}) H_{\text{eff}} dH_{\text{eff}}. \quad (14)$$

При $T = 0$ спиновые поляризации $j_F = 1$, $j_M = \pm 1$, и $W_F^{(0)} \equiv W_F(1, \pm 1) = -8[(1 - q)J_{FF} \pm qJ_{FM}]$. Аналогично средняя энергия на один M -атом при $T = 0$ равна $W_M^{(0)} = -8[qJ_{MM} \pm (1 - q)J_{FM}]$, так что общая энергия системы на один любой атом есть

$$W_{\pm}^{(0)} = (1 - q)W_F^{(0)} + qW_M^{(0)} = -8[(1 - q)^2 J_{FF} \pm 2q(1 - q)J_{FM} + q^2 J_{MM}]. \quad (15)$$

Заметим, что $W_{+}^{(0)} = -8J_{FF}$ при $J_{FF} = J_{FM} = J_{MM}$ для произвольного q .

Минимуму энергии соответствует основное состояние, которое может быть ферро-, ферри- или антиферромагнитным в зависимости от величин и знаков эффективных взаимодействий J_{FF} , J_{FM} и J_{MM} .

Точно так же можно ввести средний параметр Эдвардса–Андерсона на один F -атом

$$Q_{EA}(j_F, j_M) = - \int_{-\infty}^{\infty} F(j_F, j_M, H_{\text{eff}}) \text{th}^2 \left[\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T} \right] dH_{\text{eff}} \quad (16)$$

в форме, предложенной в [15]. Он описывает спин-стеклольную фазу с ненулевым квадратом намагниченности (усредненным по узлам решетки), появляющимся ниже некоторой критической температуры T_g . Но в этой работе спин-стеклольное состояние обсуждаться не будет.

Если „правила“ игры задаются ферромагнитными F -атомами (т.е. если $|J_{FF}| \gg |J_{MM}|$ и $|J_{FM}| \gg |J_{MM}|$), то решение системы уравнений (11), (12) позволяет найти концентрационную и температурную зависимости $j_F(q, T)$, $j_M(q, T)$ поляризаций атомов при известных полях взаимодействия J_{FF} , J_{FM} , J_{MM} . В других случаях (например, когда концентрация q примесей высока, а их взаимодействие антиферромагнитно) магнитная структура системы примесей может определяться их собственным взаимодействием с $J_{MM} < 0$. В этом случае нужно исследовать несколько более сложную примесную магнитную структуру (например, две различные магнитные подрешетки с противоположной намагниченностью).

Для определения „фоновой“ намагниченности матрицы F -атомов (без M -примесей) и ее температурной зависимости достаточно использовать лишь уравнение (11),

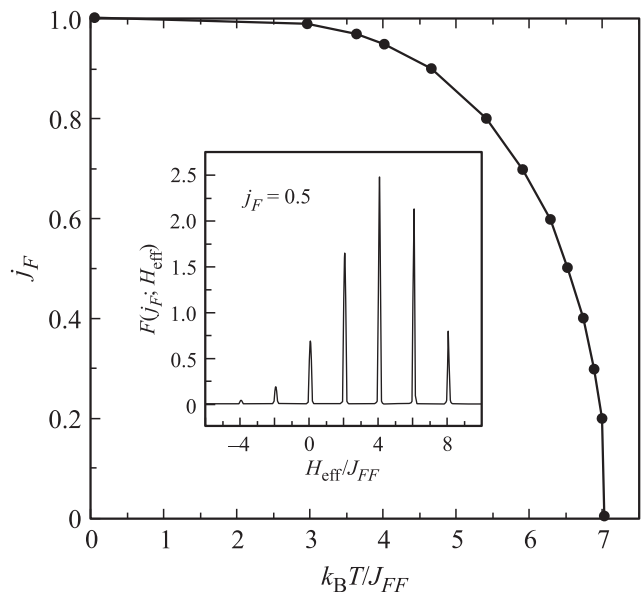


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности для системы без примесей. На вставке — функция распределения $F(0.5; H_{\text{eff}})$ для $j_F = 0.5$ (в иллюстративных целях δ -функция в (10) заменена гауссовской функцией с дисперсией $\sigma = 0.05$).

положив $q = 0$ и $n = i = 0$. В этом случае имеем уравнение

$$j_F = \frac{1}{256} \sum_{k=0}^8 (1 + j_F)^{8-k} (1 - j_F)^k \text{th}[(8 - 2k)J_{FF}/k_B T], \quad (17)$$

которое может быть записано как кубическое уравнение для $x(T) \equiv [j_F(T)]^2$

$$Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 256, \quad (18)$$

где $A = -a + b - c + d$, $B = 3a - b - 7c + 7d$, $C = -3a - b + 7c + 7d$, $D = a + b + 3c + d$ и $a = 224 \text{th}(2K)$, $b = 224 \text{th}(4K)$, $c = 32 \text{th}(6K)$, $d = 16 \text{th}(8K)$, $K = J_{FF}/k_B T$. Температура Кюри T_C определяется условием $j_F(T_C) = 0$, т.е. $D = 256$, что дает

$$K_C \equiv J_{FF}/k_B T_C \approx 0.142 \quad \text{или} \quad k_B T_C \approx 7.04 J_{FF}. \quad (19)$$

Температурная зависимость намагниченности $j_F(T)$ для этого случая представлена на рис. 2, где в иллюстративных целях показана также (на вставке) функция распределения $F(0.5; H_{\text{eff}})$ при $j_F = 0.5$. Заметим, что результат (19) гораздо ближе к „точному“ (полученному методом Монте-Карло) значению $k_B T_C \approx 6.37 J_{FF}$ [4] (расхождение около 10%), чем результат среднеполевой теории, которая дает для fcc-решетки $k_B T_C = 8 J_{FF}$ (расхождение более 20%).

3. Немагнитные примеси

Обратимся теперь к случаю немагнитных примесей, случайно размещенных в магнитной матрице (например,

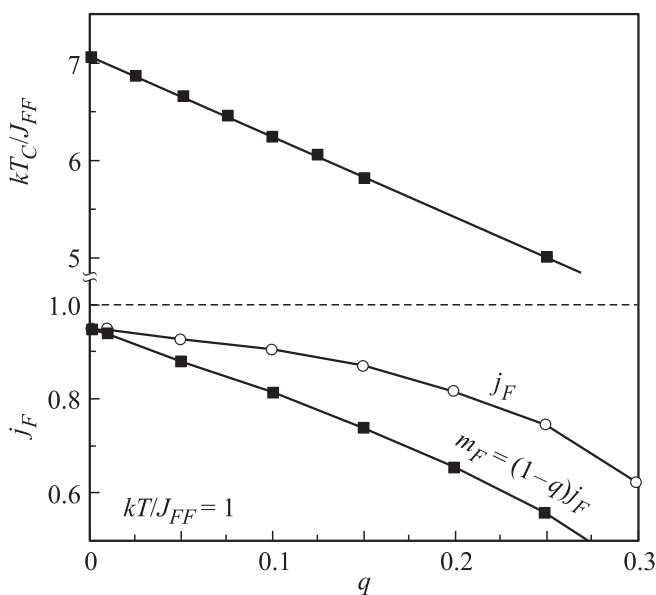


Рис. 3. Концентрационные зависимости намагниченности (при $k_B T/J_{FF} = 1$) температуры Кюри для разбавленного (немагнитными примесями) Fe-сплава.

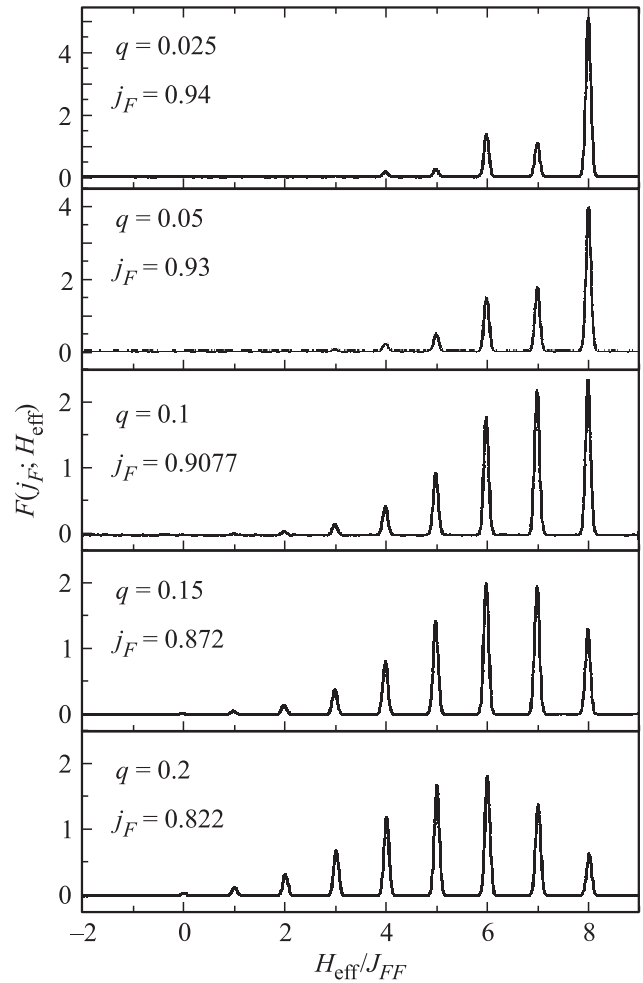


Рис. 4. Распределения эффективных магнитных полей $F(j_F; H_{\text{eff}})$ при $k_B T/J_{FF} = 1$ для систем с различными концентрациями q немагнитных примесей (величина j_F , соответствующая данному значению q , определяется исходя из рис. 3).

атомы Cu или Al в α -Fe). Полагая $J_{FM} = 0$, находим функцию распределения

$$F(j_F; H_{\text{eff}}) = \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \frac{1}{2^{8-n}} C_8^{8-n} (1 - q)^{8-n} q^n \times C_{8-n}^k (1 + j_F)^{8-n-k} (1 - j_F)^k \delta[H_{\text{eff}} - H_F(n, k)] \quad (20)$$

магнитных полей и соответствующее уравнение эффективного поля

$$j_F = \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \frac{1}{2^{8-n}} C_8^{8-n} (1 - q)^{8-n} q^n \times C_{8-n}^k (1 + j_F)^{8-n-k} (1 - j_F)^k \text{th}[H_F(n, k)/k_B T], \quad (21)$$

где $H_F(n, k) = (8 - n - 2k)J_{FF}$. Оно позволяет рассчитать концентрационные зависимости $j_F(q)$ и $T_C(q)$ поля-

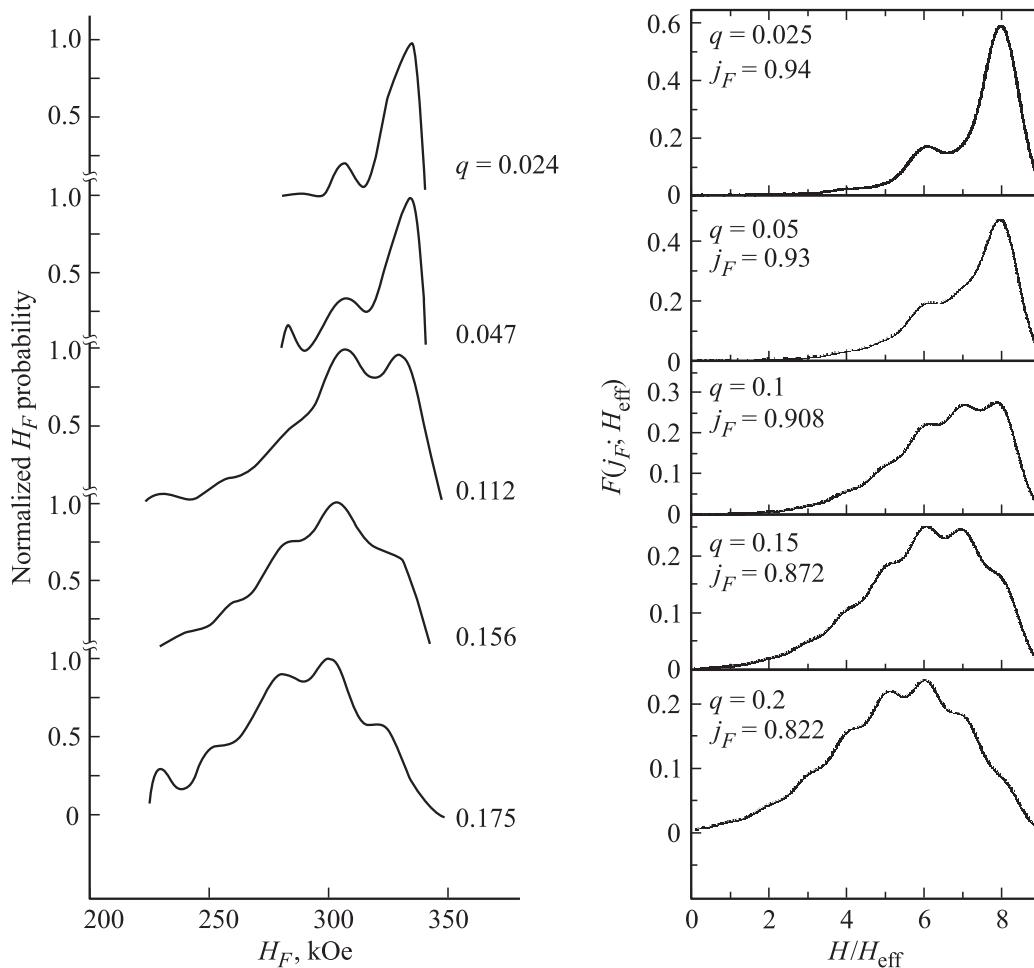


Рис. 5. Рассчитанные распределения эффективного магнитного поля $F(j_F; H_{\text{eff}})$ для $\sigma = 0.44$ при $k_B T / J_{FF} = 1$ (справа) и распределения, экспериментально измеренные (с помощью эффекта Мессбауэра) при комнатной температуре [14] (слева), для систем с различными концентрациями q немагнитных примесей. Необходимые для расчета величины j_F (соответствующие данным значениям q) получены из рис. 3.

ризации и температуры Кюри для разбавленных (немагнитными примесями) Fe-сплавов, которые представлены на рис. 3. Зависимость $T_C(q)$ согласуется с экспериментами [16] для разбавленных (Fe–Al)-сплавов.

Распределения эффективных магнитных полей $F(j_F; H_{\text{eff}})$, рассчитанные с помощью (20), показаны на рис. 4 для случая $k_B T / J_{FF} = 1$ с различными значениями q (величина j_F , соответствующая данному значению q , определяется исходя из рис. 3). Эти распределения могут быть получены в мессбауэровских экспериментах, но обычно их компоненты сильно уширены. Поэтому для того, чтобы сравнить измеренные [14] и расчетные распределения, нужно смоделировать это уширение, заменив в (20) δ -функцию, например, гауссовской функцией конечной ширины (для эксперимента при комнатной температуре была выбрана дисперсия $\sigma = 0.44$, соответствующая примерно 20% расстояния между соседними компонентами распределения). Сами распределения представлены на рис. 5 и демонстрируют очевидную схожесть.

4. Магнитные примеси

Следующий шаг — это учет обменного взаимодействия между F -атомами матрицы и примесными магнитными M -атомами, которое характеризуется эффективным полем J_{FM} , но все еще в пренебрежении взаимодействием между M -атомами (т. е. при $J_{MM} = 0$). В этом случае суммарное эффективное поле H_M на M -атомах не зависит от i (см. (13)), и уравнение (12) упрощается:

$$j_M = \sum_{n=0}^8 \sum_{k=0}^{8-n} \frac{1}{2^{8-n}} C_8^{8-n} q^n (1-q)^{8-n} \times C_{8-n}^k (1+j_F)^{8-n-k} (1-j_F)^k \text{th}[(8-n-2k)J_{FM}/k_B T]. \quad (22)$$

Это соотношение выражает поляризацию $j_M = j_M(j_F)$ примесей через поляризацию j_F матричных атомов и, будучи подставлено в (11), приводит к уравнению, определяющему j_F . Это рецепт расчета поляризаций j_F, j_M при заданных значениях T, q и J_{FF}, J_{FM} .

Как видно из уравнений (11) и (12), знак матричной поляризации j_F не зависит от знака эффективного поля J_{FM} . Это не позволяет получить информацию о природе F – M -взаимодействия (анитиферро- или ферромагнитное), что ранее отмечалось в [17]. Но знак J_{FM} однозначно определяет знак j_M (они одинаковы), так что природу F – M -взаимодействия можно идентифицировать, измеряя поляризацию M -примесей. Это можно сделать методом рентгеновской циркулярной спектроскопии (ХМCD), который позволяет отдельно измерять поляризации F - и M -атомов [18].

На рис. 6 приведены концентрационные зависимости $T_C(q)$ температуры Кюри (при $J_{MM} = 0$) для двух различных значений J_{FM} : $J_{FM} = 0.25J_{FF}$ (без видимого расхождения со случаем $J_{FM} = 0$, рис. 3) и $J_{FM} = J_{FF}$, когда рост T_C (из-за сильного взаимодействия различающихся магнитных атомов) явно виден. Поляризации j_F и j_M двух магнитных систем — матричной (F) и примесной (M) — для этих двух случаев представлены на рис. 7, 8 как функции концентрации примесей для положительного и отрицательного эффективного поля J_{FM} . Как упоминалось, знак J_{FM} влияет только на знак намагниченности j_M примесей (а не на ее абсолютную величину).

Наконец, на рис. 9 приведены зависимости температуры Кюри от концентрации M -примесей для случаев, когда они не взаимодействуют между собой ($J_{MM} = 0$), но взаимодействуют ($J_{FM} \neq 0$) с матричными, ферромагнитно взаимодействующими ($|J_{FF}| \neq 0$) F -атомами. В любом случае имеется критическая концентрация p_c M -атомов, ниже которой магнитное упорядочение в системе не возникает. Как видно из рис. 9, $p_c \approx 0.22$ при $J_{FM} = 0$ и снижается с ростом энергии J_{FM} -взаимодействия, доходя до $p_c \approx 0.06$ при $J_{FM} = J_{FF}$.

Для изучения более общего случая с $J_{MM} \neq 0$, особенно при $J_{FF} < 0$ и/или $J_{MM} < 0$, нужно разделить

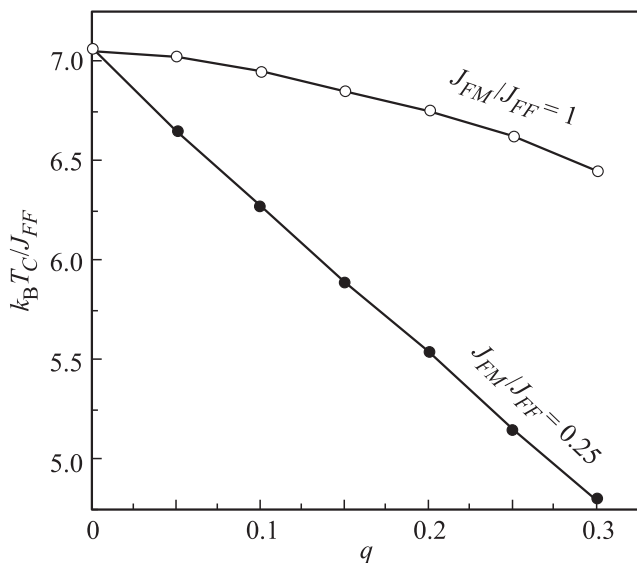


Рис. 6. Концентрационные зависимости $T_C(q)$ температуры Кюри при $J_{MM} = 0$ для различных значений J_{FM} .

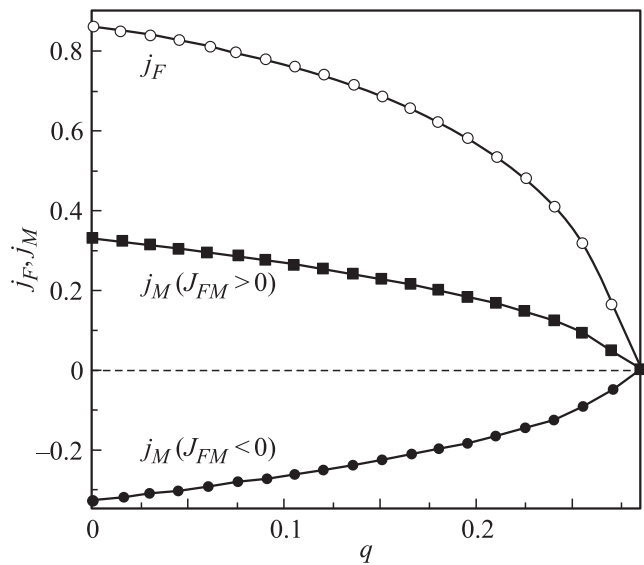


Рис. 7. Концентрационные зависимости намагниченности матричных и примесных атомов j_F, j_M для отрицательной и положительной энергии взаимодействия $J_{FM} = \pm 0.25J_{FF}$ при $J_{MM} = 0, k_B T / J_{FF} = 5$.

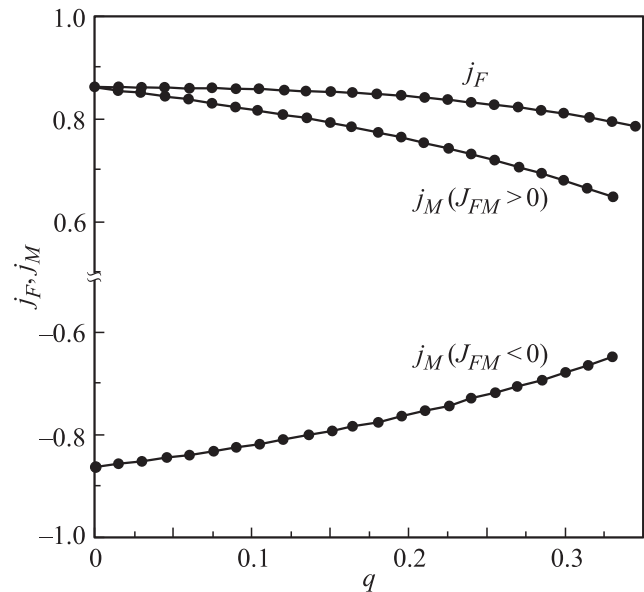


Рис. 8. То же, что на рис. 7, для $J_{FM} = \pm J_{FF}$.

все F - и/или M -атомы на различные подрешетки и записать уравнения эффективного поля для каждой из них отдельно. Подобная процедура использовалась в [19] для неразбавленных структур из магнитных атомов двух сортов. В настоящей работе этот случай не рассматривается.

Обратимся теперь к конкретной системе — магнитные примеси в матрице из немагнитного металла ($Au_{1-q}Fe_q$ [20], $Pd_{1-q}Co_q$ и др.) с косвенным взаимодействием типа взаимодействия Рудермана–Киттеля–Касуя–Иосиды (РККИ). Последнее реализуется через подвижные электроны проводимости, концентрация ко-

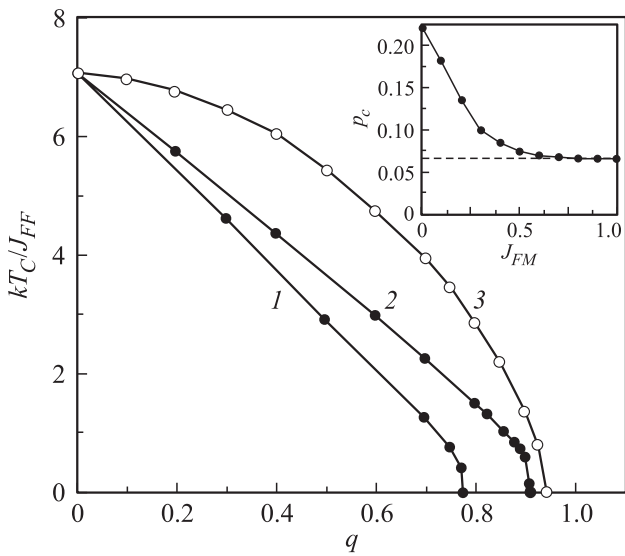


Рис. 9. Концентрационные зависимости температуры Кюри для системы, состоящей из магнитных атомов двух сортов. 1 — $J_{MM} = J_{FM} = 0$, 2 — $J_{MM} = 0, J_{FM}/J_{FF} = 0.4$, 3 — $J_{MM} = 0, J_{FM}/J_{FF} = 1$. На вставке — пороговая концентрация M -атомов как функция интенсивности их взаимодействия с F -атомами.

торых равна концентрации N матричных одновалентных атомов, частично и случайно замещенных магнитными примесями. Энергию РККИ-взаимодействия между двумя примесными атомами (i, j), находящимися на расстоянии r_{ij} друг от друга, можно записать в виде [7]

$$W_{ij} = -J_{\text{РККИ}} \phi(2k_F r_{ij}) S_i S_j, \quad (23)$$

где $J_{\text{РККИ}}$ — характерная энергия РККИ-взаимодействия, $k_F = (3\pi^2 N)^{1/3}$ — фермиевское волновое число для подвижных электронов,

$$\phi(y) = \frac{y \cos y - \sin y}{y^4} \quad (24)$$

— масштабная функция.

При низкой концентрации примесей ($q \ll 1$) функция распределения $F(j_F; H_{\text{eff}})$ таких дальнедействующих (по сравнению с рассмотренными выше обменными полями, обеспечивающими взаимодействие только между ближайшими соседями) эффективных магнитных полей близка к гауссовской [7]

$$F(j_F; H_{\text{eff}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(H_{\text{eff}} - j_F H_j)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (25)$$

где j_F — приведенная намагниченность примесей,

$$H_j(q) = \frac{1}{\pi} q \xi_H J_{\text{РККИ}}, \quad \sigma(q) = \left[\frac{1}{2\pi} q \xi_\sigma\right]^{1/2} J_{\text{РККИ}}, \quad (26)$$

$$\xi_H = \int_{2k_{Fr_{\min}}}^{\infty} y^2 |\phi(y)| dy, \quad \xi_\sigma = \int_{2k_{Fr_{\min}}}^{\infty} y^2 \phi(y) dy, \quad (27)$$

где r_{\min} — минимальное допустимое расстояние между примесями, a — постоянная решетки. Для fcc-решетки,

например, $r_{\min}/a = \sqrt{2}$, $2k_{Fr_{\min}} = \sqrt{2}(12\pi^2)^{1/3} \approx 6.94$ и $\xi_H \approx 8.8 \cdot 10^{-2}$, $\xi_\sigma \approx 4.23 \cdot 10^{-4}$.

Для сферического образца уравнение эффективного поля (2) имеет вид [7]

$$j_F = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \text{th}\left(\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T}\right) \exp\left[-\frac{(H_{\text{eff}} - j_F H_j)^2}{2\sigma^2} j\right] dH_{\text{eff}}. \quad (28)$$

При $T \rightarrow 0$ оно сводится к уравнению

$$j_F = \Phi\left(\frac{H_j}{\sqrt{2}\sigma} j\right), \quad (29)$$

где

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx,$$

и имеет ненулевое решение только при условии $H_j(q)/\sigma(q) > \sqrt{\pi}/2$. Это означает, что имеется критическая концентрация примесей q_c , такая, что дальний ферромагнитный порядок устанавливается только при $q > q_c$. Для fcc-решетки

$$q_c = \frac{\xi_\sigma}{4(\xi_H/\pi)^2} \approx 0.14. \quad (30)$$

Эту величину можно уточнить, принимая во внимание фактор размагничивания ν образца, что ведет к модифицированному соотношению [7]

$$q_c = \frac{\xi_\sigma}{4(\xi_H/\pi + Z_0)^2}, \quad Z_0 = \left(\frac{4\pi}{3} - \nu\right) \mu^2 N / J_{\text{РККИ}},$$

в котором μ — магнитный момент примеси. Это приводит к небольшой поправке к q_c . Например, для $\mu \approx \mu_B$ и $J_{\text{РККИ}} \sim 0.01$ eV критическая концентрация q_c снижается всего лишь на 10% для длинного цилиндра, намагниченного вдоль своей оси ($\nu = 0$).

Полученное пороговое значение q_c (30) удивительно близко к экспериментальной величине $q_c \approx 0.12$, измеренной различными экспериментальными методами для Au-Fe-сплавов [20].

5. Заключение

Представлен вариант теории эффективного поля, пригодный для описания разупорядоченных сплавов, которые состоят из магнитных атомов двух сортов с обменным взаимодействием между ближайшими соседями. Модель использована для расчета температуры Кюри, фазовых диаграмм, намагниченностей подрешеток магнитных атомов обоих типов и их пороговых концентраций на примере сплавов с кубической гранцентрированной решеткой.

Список литературы

- [1] С.В. Вонсовский. Магнетизм. Наука, М. (1971). 1032 с.
- [2] R. Honmura, T. Kaneyoshi. *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).
- [3] T. Hill. *Statistical Mechanics*. McGraw-Hill, N.Y. (1956). 432 p.
- [4] P.H. Lundow, K. Markström, A. Rosengren. *Phil. Mag.* **89**, 2009 (2009).
- [5] M.W. Klein, R. Brout. *Phys. Rev.* **132**, 2412 (1963).
- [6] M. Thomsen, M.F. Thorpe, T.C. Choy, D. Sherrington. *Phys. Rev. B* **30** 250 (1984); T.C. Choy, D. Sherrington, M. Thomsen, M.F. Thorpe. *Phys. Rev. B* **31**, 7355 (1985); M. Thomsen, M.F. Thorpe, T.C. Choy, D. Sherrington. *Phys. Rev. B* **33**, 1931 (1986).
- [7] E.Z. Meilikhov, R.M. Farzетdinova, *J. Magn. Magn. Mater.* **293**, 793 (2005).
- [8] B.E. Vugmeister, M.D. Glinchuk. *Rev. Mod. Phys.* **62**, 993 (1990).
- [9] A.P. Young, J.D. Reger. In: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* / Eds K. Binder, K. Binder. Springer (1992). 372 p.
- [10] В.С. Доценко. *УФН* **165**, 481 (1995).
- [11] A.S. Freitas, D.F. de Albuquerque, N.O. Moreno. *Physica A* **391**, 6332 (2012).
- [12] S.I. Sorokov, R.R. Levitskii, T.M. Verkholyak. *Phys. Status Solidi B* **211**, 759 (1999).
- [13] В.И. Белоконь, С.В. Семкин. *ЖЭТФ* **102**, 1254 (1992).
- [14] C. Paduani, E. Galvão da Silva, G.A. Perez-Alcazar, M. McElfresh. *J. Appl. Phys.* **70**, 7524 (1991).
- [15] D. Sherrington, S. Kirkpatrick. *Phys. Rev. B* **17**, 4398 (1978).
- [16] E.P. Yelsukov, E.V. Voronina, V.A. Barinov, *J. Magn. Magn. Mater.* **115**, 271 (1992).
- [17] C. Paduani, J.A. Plascak, E. Galvão da Silva. *Phys. Rev. B* **44**, 9715 (1991).
- [18] F. de Groot, A. Kotani. *Core level spectroscopy of solids series. Advances in condensed matter science*. CRC Press (2008). 512 p.
- [19] M. Aouzi, M. El Hafidi, E.M. Sakhaf. *Physica A* **345**, 575 (2005).
- [20] A.P. Murani. *J. Phys. F* **4**, 757 (1974).