УДК 538.11

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В САМОСОГЛАСОВАННОЙ ФЛУКТУАЦИОННО-ФОНОННОЙ (СФФ) МОДЕЛИ МАГНЕТИКА

В. М. Зверев, В. П. Силин

Сформулирована термодинамическая самосогласованная теория влияния фононных флуктуаций на магнетизм металлов, основанная на учете зависимости от намагничения упругих моделей всестороннего сжатия и сдвига. Обсуждаются условия проявления в температурной зависимости намагниченности и в определении температуры Кюри различных типов фононных мод. Предложено объяснение высокотемпературных магнитных свойств инварных железо-никелевых сплавов на основе фононного механизма.

В основу излагаемого подхода положены следующие физические идеи. Во-первых, само магнитное упорядочение связывается с обменным взаимодействием электронов, что общепринято [1, 2]. Во-вторых, мы используем тот факт, что магнетизм изменяет упругие свойства магнетика, приводя к зависимости модулей упругости от намагниченности, что также общеизвестно [2]. В-третьих, мы будем полностью пренебрегать обычно малым магнитострикционным эффектом, т. е. зависимостью намагниченности от деформации, но будем учитывать тот факт, что упругость магнетика зависит от намагниченности. При этом изменение упругих свойств магнетика приводит к изменению вклада фононов в свободную энергию магнетика, что приводит к обратному влиянию измененных под влиянием намагниченности упругих свойств магнетика па равновесное значение намагниченности, приводит к новой зависимости намагниченности от температуры, к новому определению температуры фазового перехода в магнитоупорядоченное состояние. Обусловленное изменением намагниченности влияние фононов на магнетизм рассматривалось и ранее. Здесь следует указать работу Хопфилда [3], в которой такое влияние рассматривалось в связи с основным состоянием магнетика и может быть усмотрено как проявление нулевых колебаний решетки. Противоречие предсказаний Хопфилда эксперименту [4] позволяет думать, что теория основного состояния магнетика должна, помимо нулевых колебаний решетки, учитывать и другие подверженные влиянию намагничения эффекты. Важное значение в разработке теории влияния фононов на магнетизм имеют работы Кима [5], в которых ставилась и решалась задача рассмотрения температурных зависимостей. Однако в этих работах, во-первых, сколько-нибудь детально не рассматривалось магнитоупорядоченное состояние, а во-вторых, что особенно важно отметить, использовалось измененное намагничением выражение для модуля всестороннего сжатия, отвечающее постоянной индукции, а не постоянному намагничению, что сделало подход Кима парадоксальным. На этот недостаток подхода Кима указано в наших работах [6]. Этот недостаток обусловлен тем, что Ким [5] в своем подходе использовал следствия динамического рассмотрения, которое отвечает случаю постоянной индукции B и в пределе $B=0$ описывает скачкообразное изменение модуля всестороннего сжатия при переходе из парамагнитного в ферромагнитное состояние металла. В наших работах [6] использовалась модель, в которой учитывалось влияние намагничения на модуль всестороннего сжатия. В настоящей статье на основании работ [6] изложен общий подход, в котором, во-первых, получены общие соотношения, описывающие влияние намагниченности на тензор модулей упругости, во-вторых, сформулированы основные положения и рассмотрены следствия самосогласованного флуктуационно-фононного подхода к теории магнетизма в изотропной модели ферромагнетика, когда, помимо влияния магнетизма на модуль всестороннего сжатия, учтено также соответствующее влияние на модуль сдвига. При этом, в частности, указаны условия, в которых как температура фазового перехода, так и температурная зависимость намагниченности определяются поперечными фононами.

Исходное выражение для плотности свободной энергии магнетика запишем в виде

$$\frac{1}{V_0} F_M (V_0, T, M, u_{ij}) = F_0 (V_0, u_{ij}) + \delta F_i (V_0, T, M, u_{ij}) + F_e (V_0, T, M, u_{ij}). \quad (1)$$

Здесь u_{ij} — тензор однородных деформаций, M — плотность намагниченности, T — температура, V_0 — объем магнетика в отсутствие деформаций. $F_0(V_0, u_{ij})$ представляет собой не зависящий от температуры вклад решетки и «немагнитных» электронов, для которого можно записать следующее разложение:

$$F_0 (V_0, u_{ij}) = F_0 (V_0) + \sigma_{ij}^{(0)} (V_0) u_{ij} + \frac{1}{2} \lambda_{ij,\, kl}^{(0)} (V_0) u_{ij} u_{kl}. \quad (2)$$

Далее $\delta F_i (V_0, T, M, u_{ij})$ определяет обращающийся в нуль при $T = 0$ вклад решетки в свободную энергию, для которого подобно (2) имеет место разложение

$$\delta F_i (V_0, T, M, u_{ij}) = \delta F_i (V_0, T, M) + \delta \sigma_{ij}^{(i)} (V_0, T, M) u_{ij} + \\ + \frac{1}{2} \delta \lambda_{ij,\, kl}^{(i)} (V_0, T, M) u_{ij} u_{kl}. \quad (3)$$

В этой работе мы воспользуемся следующим обобщением модели соответственных состояний [7, 8]:

$$\delta F_i (V_0, T, M) = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha=1,\,2,\,3} \Theta_M^{(\alpha)} (V_0, M) \left[f_\alpha \left(\frac{T}{\Theta_M^{(\alpha)} (V_0, M)} \right) - f_\alpha (0) \right]. \quad (4)$$

При этом для трех дебаевских температур $\Theta_M^{(\alpha)}$, отвечающих трем акустическим степеням свободы решетки, принимаем $\varkappa \Theta_M^{(\alpha)} = \hbar \bar{u}_M^{(\alpha)} [6\pi^2 N_A / V_0]^{1/3}$; $\bar{u}_M^{(\alpha)}$ — характерная скорость звука α-й моды, N_A — число атомов магнетика, $\varkappa$ — постоянная Больцмана, $\hbar$ — постоянная Планка. В частном случае изотропной модели, когда $\alpha = 1$ отвечает продольной моде,

$$\Theta_M^{(l)} (V_0, M) = \frac{\hbar}{\varkappa \rho_m^{1/2}} \left(\frac{6\pi^2 N_A}{V_0} \right)^{1/3} \left[K_M (V_0, M) + \frac{4}{3} \mu_M (V_0, M) \right]^{1/2}, \quad (5)$$

а если $\alpha = 2{,}3$ отвечают поперечным модам, то

$$\Theta_M^{(t)} (V_0, M) = \frac{\hbar}{\varkappa \rho_m^{1/2}} \left(\frac{6\pi^2 N_A}{V_0} \right)^{1/3} \mu_M^{1/2} (V_0, M). \quad (6)$$

Здесь ρ_m — плотность массы недеформированного тела, $K_M(V_0, M)$ — изотермический модуль всестороннего сжатия при постоянной намагниченности, $\mu_M (V_0, M)$ — соответствующий модуль сдвига.

Явные зависимости от плотности намагниченности определяются в нашем рассмотрении третьим слагаемым формулы (1), которое представляет вклад в плотность свободной энергии магнитных коллективизированных подвижных электронов

$$F_e(V_0,\ T,\ M,\ u_{ij}) = \left(1+\frac{\Delta V}{V_0}\right)\left\{-\varkappa T\left\langle \ln\left[1+\exp\left(\frac{\eta-\varepsilon(\mathbf{p})-\Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij}+b}{\varkappa T}\right)\right]+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\ln\left[1+\exp\left(\frac{\eta-\varepsilon(\mathbf{p})-\Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij}-b}{\varkappa T}\right)\right]\right\rangle+\frac{\psi(u_{ij})}{2\beta^2}M^2+\frac{b}{\beta}M\right\}+\frac{N}{V_0}\eta. \tag{7}$$

Здесь $\langle A(\mathbf{p})\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int d\mathbf{p}A(\mathbf{p})$, где $\mathbf{p}$ — квазиимпульс электрона; N — принимаемое постоянным полное число магнитных электронов; β — магнитный момент электрона; относительное изменение объема под действием деформаций определяется выражением

$$\Delta V(u_{ij})/V_0 = u_{ii} - (1/2)\,u_{ii}^2 + 2\mathscr{M}_{ii}, \tag{8}$$

где $\mathscr{M}_{ij}$ — матрица миноров матрицы u_{ij}, а изменение энергии электрона под действием деформаций принимается в виде (см., например, [9])

$$\varepsilon(\mathbf{p},\ u_{ij}) = \varepsilon(\mathbf{p}) + \Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij}, \tag{9}$$

где $\Lambda_{ij}(\mathbf{p})$ — тензор деформационного потенциала. Соответствующую зависимость параметра обменного взаимодействия представим в виде

$$\psi(u_{ij}) = \psi + p_{ij}u_{ij} + \frac{1}{2}p_{ij,\ kl}u_{ij}u_{kl}. \tag{10}$$

Наконец, входящие в формулу (7) химический потенциал η и энергия b обменного расщепления уровней электронов определяются как функции T, M, u_{ij} уравнениями, которые по форме аналогичны используемым в теории Стонера (см., например, [10])

$$M = \beta\langle f_F[\varepsilon(\mathbf{p}) + \Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij} - b - \eta,\ T] - f_F[\varepsilon(\mathbf{p}) + \Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij} + b - \eta,\ T]\rangle,$$
$$\frac{N}{V_0} = \left(1+\frac{\Delta V}{V_0}\right)\langle f_F[\varepsilon(\mathbf{p}) + \Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij} - b - \eta,\ T] +$$
$$+ f_F[\varepsilon(\mathbf{p}) + \Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,u_{ij} + b - \eta,\ T]\rangle, \tag{11}$$

где $f_F(\varepsilon,\ T)$ — фермиевская функция распределения. Формулы (11) позволяют записать

$$b(V_0,\ T,\ M,\ u_{ij}) = b(V_0,\ T,\ M) + b_{ij}(V_0,\ T,\ M)\,u_{ij},$$
$$\eta(V_0,\ T,\ M,\ u_{ij}) = \eta(V_0,\ T,\ M) + \eta_{ij}(V_0,\ T,\ M)\,u_{ij}, \tag{12}$$

где $b(V_0,\ T,\ M)$ и $\eta(V_0,\ T,\ M)$ определяются уравнениями (11), в которых принято $u_{ij}=0$, а для коэффициентов, определяющих деформационную зависимость, имеем

$$b_{ij} = \beta(Y_{ij}^{+} - Y_{ij}^{-}),\quad \eta_{ij} = \beta(Y_{ij}^{+} + Y_{ij}^{-}), \tag{13}$$

где

$$Y_{ij}^{\sigma} = \left(\frac{N}{2V_0}\delta_{ij} + \langle\Lambda_{ij}f_\sigma'\rangle\right)(2\beta\langle f_\sigma'\rangle)^{-1},$$

$$f_\sigma' \equiv \frac{\partial}{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}f_F[\varepsilon(\mathbf{p}) - \sigma b(V_0,\ T,\ M) - \eta(V_0,\ T,\ M),\ T].$$

При этом отметим, что согласно формулам (7), (8), при разложении (7) по степеням тензора u_{ij} достаточно в (12) ограничиться только линейными по u_{ij} слагаемыми. В результате получаем

$$F_e(V_0,\ T,\ M,\ u_{ij}) = F_e(V_0,\ T,\ M) + \sigma_{ij}^{(e)}(V_0,\ T,\ M)\left(u_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}u_{ll}\right) -$$
$$- P_e(V_0,\ T,\ M)\frac{\Delta V}{V_0} + \frac{1}{2}\lambda_{ij;\ kl}^{(e)}(V_0,\ T,\ M)\,u_{ij}u_{kl}. \tag{14}$$

Здесь

$$F_e(V_0,\ T,\ M) = \Omega_e(V_0,\ T,\ M) + \frac{N}{V_0}\eta(V_0,\ T,\ M) \tag{15}$$

представляет собой плотность свободной энергии магнитных электронов в отсутствие деформаций, а

$$\Omega_e(V_0, T, M) = -\varkappa T\left\langle \ln\left[1+\exp\left(\frac{\eta(V_0, T, M) - \varepsilon(\mathbf{p}) + b(V_0, T, M)}{\varkappa T}\right)\right] + \right.$$

$$\left. + \ln\left[1+\exp\left(\frac{\eta(V_0, T, M) - \varepsilon(\mathbf{p}) - b(V_0, T, M)}{\varkappa T}\right)\right]\right\rangle +$$

$$+ \frac{\psi}{2\beta^2}M^2 + \frac{b(V_0, T, M)}{\beta}M \tag{16}$$

— плотность термодинамического потенциала. Электронное давление P_e и тензор сдвиговых напряжений $\sigma_{ij}^{(e)}$ имеют вид

$$P_e(V_0, T, M) = -\left[\Omega_e(V_0, T, M) + \frac{1}{3}\langle\Lambda_{jj}(f_+ + f_-)\rangle + \frac{p_{jj}}{6\beta^2}M^2\right],$$

$$\sigma_{ij}^{(e)}(V_0, T, M) = \langle\Lambda_{ij}(f_+ + f_-)\rangle + \frac{p_{ij}}{2\beta^2}M^2. \tag{17}$$

Возникающий в формуле (14) вклад магнитных электронов в тензор упругих модулей определяется выражением

$$\lambda_{ij,\,kl}^{(e)}(V_0, T, M) = \langle(\Lambda_{ij}\delta_{kl} + \Lambda_{kl}\delta_{ij})(f_+ + f_-)\rangle + \langle\Lambda_{ij}\Lambda_{kl}(f'_+ + f'_-)\rangle -$$

$$-4\beta^2(\langle f'_+\rangle Y^+_{ij}Y^+_{kl} + \langle f'_-\rangle Y^-_{ij}Y^-_{kl}) + (p_{ij}\delta_{kl} + p_{kl}\delta_{ij} + p_{ij,\,kl})\frac{M^2}{2\beta^2}. \tag{18}$$

В результате можно записать следующее разложение исходного выражения (1) для свободной энергии:

$$\frac{1}{V_0}F_M(V_0, T, M, u_{ij}) = \frac{1}{V_0}F_M(V_0, T, M) - P(V_0, T, M)\frac{\Delta V(u_{ij})}{V_0} +$$

$$+ \sigma_{ij}(V_0, T, M)\left(u_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}u_{ll}\right) + \frac{1}{2}\lambda_{ij,\,kl}(V_0, T, M)\,u_{ij}u_{kl}. \tag{19}$$

Здесь

$$\frac{1}{V_0}F_M(V_0, T, M) = F_0(V_0) + \delta F_i(V_0, T, M) + F_e(V_0, T, M) \tag{20}$$

— плотность свободной энергии недеформированного магнетика, а давление P, тензор внутренних сдвиговых напряжений σ_{ij} и тензор модулей упругости определяются соответственно выражениями

$$P(V_0, T, M) = P_e(V_0, T, M) - \frac{1}{3}\left[\sigma_{jj}^{(0)}(V_0) + \delta\sigma_{jj}^{(i)}(V_0, T, M)\right], \tag{21}$$

$$\sigma_{ij}(V_0, T, M) = \sigma_{ij}^{(e)}(V_0, T, M) + \sigma_{ij}^{(0)}(V_0) + \delta\sigma_{ij}^{(i)}(V_0, T, M), \tag{22}$$

$$\lambda_{ij,\,kl}(V_0, T, M) = \lambda_{ij,\,kl}^{(e)}(V_0, T, M) + \lambda_{ij,\,kl}^{(0)}(V_0) + \delta\lambda_{ij,\,kl}^{(i)}(V_0, T, M). \tag{23}$$

Отметим, что сдвиговые внутренние напряжения описываются только теми элементами тензора (22), которые отвечают $\sigma_{ij} - (1/3)\delta_{ij}\sigma_{ll}$, что вытекает из формулы (19).

Для нахождения упругих модулей, которые определяют дебаевские температуры, во-первых, будем рассматривать условия, в которых отсутствуют внешние напряжения. Тогда

$$P(V_0, T, M) = 0, \quad \sigma_{ij}(V_0, T, M) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{ll}(V_0, T, M) = 0. \tag{24}$$

Во-вторых, пренебрежем малыми изменениями объема V_0 с температурой и намагничением, а также будем определять V_0 как объем ферромагнетика при $T = 0$.

Проиллюстрируем общую схему СФФ подхода на простом примере изотропного магнетика, упругие свойства которого характеризуются двумя параметрами: модулем всестороннего сжатия K_M и модулем сдвига μ_M. При этом

$$\lambda_{ij,\,kl}(V_0,\ 0,\ M)=K_M(V_0,\ M)\,\delta_{ij}\delta_{kl}+\mu_M(V_0,\ M)\left[\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk}-\frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right]. \qquad (25)$$

С помощью соотношений (18), (23) и (25) получаем

$$K_M(V_0,\ M)=K_0(V_0)+(p_1+p_1^2+p_2)\frac{\psi}{2\beta^2}M^2+2(\Lambda^+ +\Lambda^-)+$$
$$+Z_1^+ +Z_1^- -4\beta^2[\langle f_+'\rangle(Y^+)^2+\langle f_-'\rangle(Y^-)^2], \qquad (26)$$
$$\mu_M(V_0,\ M)=\mu_0(V_0)+p_3\frac{\psi}{2\beta^2}M^2+Z_2^+ +Z_2^-. \qquad (27)$$

В формулах (26) и (27) величины $K_0(V_0)$ и $\mu_0(V_0)$ представляют собой не зависящие от намагниченности модули, определяющиеся как решеткой, так и немагнитными электронами. При получении формул (26) и (27) учтены следующие соотношения:

$$Y_{ij}^\sigma\equiv Y^\sigma\delta_{ij},\quad \langle\Lambda_{ij}f_\sigma\rangle\equiv\Lambda^\sigma\delta_{ij},\quad p_{ij}\equiv\frac{1}{2}\psi p_1\delta_{ij},$$

$$\langle\Lambda_{ij}\Lambda_{kl}f_\sigma'\rangle=Z_1^\sigma\delta_{ij}\delta_{kl}+Z_2^\sigma\left[\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk}-\frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right],$$

$$p_{ij,\,kl}=\psi(p_1^2+p_2)\,\delta_{ij}\delta_{kl}+\psi p_3\left[\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk}-\frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right].$$

При этом

$$Y^\sigma=Y[\eta(V_0,\ 0,\ M)+\sigma b(V_0,\ 0,\ M)],\quad \Lambda^\sigma=\Lambda[\eta(V_0,\ 0,\ M)+\sigma b(V_0,\ 0;\ M)],$$
$$Z_{1,\,2}^\sigma=-Z_{1,\,2}[\eta(V_0,\ 0,\ M)+\sigma b(V_0,\ 0,\ M)].$$

Проведенное рассмотрение позволяет теперь перейти к использованию в отсутствие однородных деформаций уравнения

$$B=V_0^{-1}[\partial F_M(V_0,\ T,\ M)/\partial M]_{V_0,\,T},$$

определяющего магнитную индукцию и имеющему, согласно (20), следующий вид:

$$b=\beta B-\frac{\psi}{\beta}M-\frac{\beta}{V_0}\sum_{\alpha=1,\,2,\,3}\left(\frac{\partial\Theta_M^{(\alpha)}}{\partial M}\right)_{V_0}\varphi_\alpha\left(\frac{T}{\Theta_M^{(\alpha)}}\right)=\beta B-\frac{\psi}{\beta}M-$$
$$-\frac{\beta}{2V_0}\left\{\Theta_M^{(l)}\varphi_l\frac{T}{\Theta_M^{(l)}}\left(\frac{\partial\ln(K_M+4\mu_M/3)}{\partial M}\right)_{V_0}+2\Theta_M^{(t)}\varphi_t\left(\frac{T}{\Theta_M^{(t)}}\right)\left(\frac{\partial\ln\mu_M}{\partial M}\right)_{V_0}\right\}. \qquad (28)$$

Здесь

$$\varphi_\alpha(x)=f_\alpha(x)-f_\alpha(0)-xf_\alpha'(x).$$

Уравнение (28) совместно с уравнениями (11) при $u_{ij}=0$ составляет основу СФФ подхода и позволяет найти любые величины, характеризующие термодинамически равновесное недеформированное состояние магнетика.

Продемонстрируем применение развитого выше подхода к описанию слабоферромагнитных металлов, когда $(MV_0/\beta N)^2\ll 1$. При этом удается получить сравнительно простые аналитические закономерности. Прежде всего из уравнений (11) получим следующие явные зависимости от температуры и намагниченности:

$$b(V_0,\ T,\ M)=\frac{M}{2\beta\nu}\left[1-\frac{o_3'M^2}{24\beta^2}-\frac{1}{6}o_1'(\pi\varkappa T)^2\right],$$

$$\eta(V_0,\ T,\ M)=\eta_0-\frac{1}{2}o_1\left[b^2(V_0,\ T,\ M)+\frac{1}{3}(\pi\varkappa T)^2\right], \qquad (29)$$

где $o_n'=\nu'/\nu^n$, $\nu=\nu(\eta_0)$ — плотность электронных состояний на уровне Ферми $\eta_0=\eta(V_0,\ 0,\ 0)$, определяющемся уравнением

$$N/2V_0 = \int\limits_0^{\eta_0} d\varepsilon\nu(\varepsilon).$$

В соответствии с формулами (29) имеем

$$-2\beta\nu Y^\sigma = \frac{N}{2V_0} - \Lambda - \frac{\sigma b}{\nu}\left[\nu'\left(\frac{N}{2V_0} - \Lambda\right) + \nu\Lambda'\right] +$$
$$+ \frac{b^2}{2\nu}\left[\frac{3(\nu')^2 - \nu\nu''}{\nu}\left(\frac{N}{2V_0} - \Lambda\right) + 3\nu'\Lambda' - \nu\Lambda''\right],$$

$$\Lambda^\sigma = \int\limits_0^{\eta_0} d\varepsilon\Lambda(\varepsilon) + \sigma b\Lambda - \frac{1}{2}b^2(o_1\Lambda - \Lambda'),$$

$$Z_{1,2}^\sigma = -Z_{1,2} - \sigma b Z'_{1,2} + \frac{1}{2}b^2(o_1 Z'_{1,2} - Z''_{1,2}), \tag{30}$$

где

$$\Lambda \equiv \Lambda(\eta_0), \quad Z_{1,2} \equiv Z_{1,2}(\eta_0).$$

Формулы (29), (30) позволяют получить зависимость упругих модулей (26), (27) от плотности намагниченности для случая слабоферромагнитных металлов

$$K_M = K + \frac{\tau_k M^2}{4\beta^2\nu}, \quad \mu_M = \mu + \frac{\tau_\mu M^2}{4\beta^2\nu}. \tag{31}$$

Здесь не зависящие от намагниченности модули упругости определяются формулами

$$K = K_0 + \frac{2}{\nu}\left(\frac{N}{2V_0} - \Lambda\right)^2 + 4\int\limits_0^{\eta_0} d\varepsilon\Lambda(\varepsilon) - 2Z_1, \quad \mu = \mu_0 - 2Z_2. \tag{32}$$

Безразмерные параметры τ_k и τ_μ в формулах (31) определяют зависящий от намагниченности электронный вклад в упругие модули

$$\tau_k = (2\psi\nu)(p_1 + p_1^2 + p_2) - \left(\frac{N}{2V_0} - \Lambda\right)^2 o'_3 - 2\left(\frac{N}{2V_0} - \Lambda\right)\frac{\nu\Lambda'' - 3\nu'\Lambda'}{\nu^3} +$$
$$+ \frac{2}{\nu^2}[(\Lambda')^2 - \nu'\Lambda + \nu\Lambda'] + \frac{1}{\nu^2}(\nu' Z'_1 - \nu Z''_1), \tag{33}$$

$$\tau_\mu = (2\psi\nu)p_3 + \frac{1}{\nu^2}(\nu' Z'_2 - \nu Z''_2). \tag{34}$$

Если пренебречь зависимостью обменного взаимодействия от деформаций, а также деформационным потенциалом, то $\tau_\mu = 0$, а $\tau_k = \tau_0 \equiv \equiv -(N^2 o'_3/4V_0^2)$. Отметим, что τ_0 может быть порядка единицы. Учет деформационного взаимодействия изменяет τ_k на величину, сравнимую с τ_0, а также приводит к отличному от нуля значению τ_μ, которое по порядку величины сравнимо с τ_0.

Соотношения (28), (29), (31) позволяют записать следующее уравнение для плотности намагниченности в форме Белова—Арротта (ср. [6])

$$\frac{2\chi_0 B}{M} + \frac{M^2}{M_0^2} = 1 - \frac{T^2}{T_0^2} - \left(1 - \frac{T_c^2}{T_0^2}\right)\frac{\Phi(T)}{\Phi(T_c)}. \tag{35}$$

Здесь коэффициенты

$$\chi_0 = \frac{\beta^2\nu}{1 + 2\psi\nu}, \quad T_0^2 = \frac{6(1 + 2\psi\nu)}{(\pi\varkappa)^2 o'_1}, \quad M_0^2 = \frac{24\beta^2}{o'_3}(1 + 2\psi\nu)$$

соответствуют обычной стонеровской теории слабого ферромагнетика (см., например, [10]).

Функция $\Phi(T)$ имеет вид

$$\Phi(T)=\Theta^{(l)}\frac{\tau_k+4\tau_\mu/3}{K+4\mu/3}\varphi_l\left(\frac{T}{\Theta^{(l)}}\right)+2\Theta^{(t)}\frac{\tau_\mu}{\mu}\varphi_t\left(\frac{T}{\Theta^{(t)}}\right). \tag{36}$$

Температура Кюри фазового перехода второго рода из парамагнитного состояния в ферромагнитное определяется уравнением

$$\Phi(T_c)+(1-T_c^2/T_0^2)(1+2\psi\nu)\,2V_0=0. \tag{37}$$

Прежде чем переходить к обсуждению следствий уравнений (35)—(37) для ферромагнитной фазы и фазового перехода, укажем, что формула (35) позволяет получить выражение для магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе

$$\chi(V_0,\ T)=2\chi_0\left\{1-\frac{T^2}{T_0^2}+\frac{1}{1+2\psi\nu}\frac{1}{2V_0}\left[2\Theta^{(t)}\frac{\tau_\mu}{\mu}\varphi_t\left(\frac{T}{\Theta^{(t)}}\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\Theta^{(l)}\frac{\tau_k+4\tau_\mu/3}{K+4\mu/3}\varphi_l\left(\frac{T}{\Theta^{(l)}}\right)\right]\right\}^{-1}, \tag{38}$$

которое записано в виде, пригодном также и для магнитоупорядоченных металлов.

Для дальнейшего анализа полезно использовать следующие асимптотические формулы:

$$\Theta^{(i)}\varphi_i\left(\frac{T}{\Theta^{(i)}}\right)\approx(T-\alpha_i\Theta^{(i)})\,C_i,\quad C_i=N_A,\quad T>\Theta^{(i)}, \tag{39}$$

α_i — численные коэффициенты меньшие единицы (в модели Дебая $\alpha_l=\alpha_t=3/8\approx0.375$, а в реальных веществах α_i могут отличаться от этого значения),

$$\Theta^{(\alpha)}\varphi_\alpha\left(\frac{T}{\Theta^{(\alpha)}}\right)\approx TC_\alpha(T)/4,\quad C_\alpha(T)=C_\alpha^{(0)}\left(\frac{T}{\Theta^{(\alpha)}}\right)^3,\quad T<\Theta^{(\alpha)}, \tag{40}$$

где в общем случае

$$C_\alpha(T)=-(T/\Theta^{(\alpha)})\,f_\alpha''(T/\Theta^{(\alpha)})$$

— парциальные вклады в решеточную теплоемкость $C_{ph}(T)=C_l(T)+2C_t(T)$ продольных и поперечных акустических фононов.

Будем также учитывать, что $\Theta^{(l)}/\Theta^{(t)}=\sqrt{2(1-\sigma)/(1-2\sigma)}>\sqrt{2}$, поскольку для коэффициента Пуассона σ выполнено неравенство $0<\sigma<1/2$ [7]. Тогда можно утверждать, что в зависимости от соотношения температуры Кюри T_c и дебаевских температур $\Theta^{(l)}$ и $\Theta^{(t)}$ можно разделить ферромагнетики на три качественно различные группы.

Первый предельный случай высокотемпературных ферромагнетиков, у которых $T_c>\Theta^{(l)}$, характерен тем, что у них температура фазового перехода определяется продольными и поперечными фононами. Именно, согласно уравнению (37), в пределе $T_c^2\ll T_0^2$ получаем

$$T_c=\Gamma\frac{|1+2\psi\nu|\,2V_0K}{\tau_0C_{ph}}+\alpha\Theta, \tag{41}$$

где

$$\Gamma=\left[\frac{1}{3}\frac{\tau_k/\tau_0+4\tau_\mu/3\tau_0}{1+4\mu/3K}+\frac{2}{3}\frac{\tau_\mu/\tau_0}{\mu/K}\right]^{-1},$$

$$\alpha\Theta=\frac{\Gamma}{3}\left[\frac{\tau_k/\tau_0+4\tau_\mu/3\tau_0}{1+4\mu/3K}\alpha_l\Theta^{(l)}+2\frac{\tau_\mu/\tau_0}{\mu/K}\alpha_t\Theta^{(t)}\right].$$

Соответственно этому для высокотемпературных ферромагнетиков уравнение Белова—Арротта (35) имеет следующие асимптотики:

$$\frac{2\chi_0 B}{M}+\frac{M^2}{M_0^2}=\xi\left(1-\frac{T}{T_c}\right),\quad \xi=\left(1-\frac{a\Theta}{T_c}\right)^{-1},\quad \Theta^{(t)}<\Theta^{(l)}<T, \tag{42}$$

$$\frac{2\chi_0 B}{M}+\frac{M^2}{M_0^2}=1+\frac{1}{1+2\psi\nu}\frac{1}{V_0}\left[\frac{\tau_\mu}{\mu}C_t(T-a_t\Theta^{(t)})+\frac{\tau_k+4\tau_\mu/3}{K+4\mu/3}\frac{C_l^{(0)}}{8}\frac{T^4}{(\Theta^{(l)})^3}\right],$$
$$\Theta^{(t)}<T<\Theta^{(l)}, \tag{43}$$

$$\frac{2\chi_0 B}{M}+\frac{M^2}{M_0^2}=1+\frac{1}{1+2\psi\nu}\frac{T^4}{8V_0}\left[\frac{2\tau_\mu C_t^0}{\mu(\Theta^{(t)})^3}+\frac{\tau_k+4\tau_\mu/3}{K+4\mu/3}\frac{C_l^{(0)}}{(\Theta^{(l)})^3}\right],$$
$$T<\Theta^{(t)}<\Theta^{(l)}. \tag{44}$$

В случае формулы (44) легко усмотреть условия выполнения неравенства

$$\frac{(\tau_k/\tau_\mu)+(4/3)}{[(K/\mu)+(4/3)]^{5/2}}\leqslant 2\frac{C_t^{(0)}}{C_l^{(0)}}, \tag{45}$$

в которых вклад продольных фононов в правую часть формулы (44) пренебрежимо мал. В условиях (45) особенно выпукло смотрится предельный случай низкотемпературных ферромагнетиков, температура Кюри которых ниже дебаевской температуры поперечных фононов, когда из формулы (37) имеем

$$T_c^4=-\frac{4(\Theta^{(t)})^3 V_0\mu}{\tau_\mu C_t^{(0)}}(1+2\psi\nu). \tag{46}$$

Очевидно, что в этом случае температура Кюри определяется только поперечными фононами, а продольные флуктуации оказываются «замороженными». Для низкотемпературных ферромагнетиков уравнение Белова—Арротта принимает вид

$$\frac{2\chi_0 B}{M}+\frac{M^2}{M_0^2}=1-\frac{T^4}{T_c^4}. \tag{47}$$

Третью, промежуточную, группу составляют ферромагнетики, температура Кюри которых лежит в интервале $\Theta^{(t)}<T_c<\Theta^{(l)}$. Для таких ферромагнетиков уравнение Белова—Арротта принимает вид (43), (44). Особенно простое выражение для температуры Кюри при этом может быть записано в условия выполнения неравенства

$$\frac{1+(3\tau_k/4\tau_\mu)}{1+3K/4\mu}\leqslant\frac{C_t(\Theta^{(l)})^3}{C_l^{(0)}T_c^3}. \tag{48}$$

Именно при этом получаем

$$T_c=-(1+2\psi\nu)\frac{V_0\mu}{C_t\tau_\mu}+a_t\Theta^{(t)}. \tag{49}$$

В этом случае, как и для формулы (46), продольные флуктуации оказываются замороженными, а температура Кюри определяется модулем сдвига и теплоемкостью поперечных фононов.

Таким образом, мы показываем, как вклад в термодинамику различных фононных мод проявляется в определении температуры фазового перехода и в законе зависимости намагниченности от температуры. Подчеркнем, что закон Белова—Арротта позволяет непосредственно перенести полученные зависимости на закономерности изменения с температурой магнитной восприимчивости.

В заключение продемонстрируем возможность объяснения высокотемпературных магнитных свойств сплава $Fe_{1-x}Ni_x$ инварного состава ($x\approx 0.35$) на основе развитого фононного механизма разрушения магнитного порядка. Согласно экспериментальным результатам работ [11, 12], уравнение магнитного состояния инварного железо-никелевого сплава в высокотемпературной области $0.5\,T_c\leqslant T\leqslant T_c=510$ K отвечает выражению (42) при $B=0$ и $\xi=1.3$. При этом сравнительно грубое описание решетки сплава, основанное на единой дебаевской температуре Θ для всех звуковых мод, дает значение $\Theta=350$ K [13], меньшее температуры Кюри, что оправдывает использование выражения (42) в области высоких температур. По известным экспериментальным значениям ξ и T_c можно найти величину $\alpha\Theta=115$ K, а использование температуры $\Theta=350$ K приводит к значению коэффициента $\alpha\approx0.33$, несколько меньшему его величины в модели Дебая ($\alpha=3/8\approx0.375$). Для вычисления температуры Кюри сплава по нашей теории, согласно формуле (41), будем использовать для τ_0 выражение

$$\tau_0=-\frac{N^2}{4V_0^2}\,\sigma_3'=-6\,(1+2\psi\nu)\left(\frac{\beta N}{M_0V_0}\right)^2.$$

Тогда формулу (41) можно записать в виде

$$T_c=\Gamma\,\frac{KV_{\text{mol}}}{9R}\left(\frac{\mu}{n}\right)^2+\alpha\Theta. \tag{50}$$

Здесь $R=8.314\cdot10^7$ эрг$\cdot$K^{-1} — газовая постоянная, $V_0=V_{\text{mol}}$— молярный объем, $\mu=(M_0V_0/\beta N_A)$ — намагниченность на атом в магнетонах Бора, $n=N/N_A$ — число электронов на атом. Выражение (50) при следующих экспериментальных значениях: $K=1.25\cdot10^3$ K$\cdot$бар [14], $V_{\text{mol}}=6.9$ см^3 [15], $\mu=1.6$ [16], $n=8.6$ [16] и найденной нами выше величине $\alpha\Theta=115$ K дает экспериментально измеряемую температуру Кюри $T_c=510$ K, если коэффициент Γ принять равным единице. Последнее предположение в соответствии с развитой нами теорией представляется вполне разумным.

Наконец, подчеркнем, что такие свойства инварного сплава $Fe_{1-x}Ni_x$ ($x\approx0.35$), как малость коэффициента теплового расширения в области температур $T<T_c$, отношение барических производных температуры Кюри и спонтанной намагниченности M_0, также могут быть поняты на основе предложенного механизма, как это показано в работах [6].

Все это дает основание говорить о правомерности использования фононного механизма для интерпретации инварных свойств железо-никелевых сплавов.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем здесь выражение для тензора изотермических модулей упругости при постоянной плотности намагниченности и равной нулю температуре для анизотропного слабого ферромагнетика

$$\lambda_{ij,\,kl}(V_0,\,0,\,M)=\lambda_{ij,\,kl}(V_0,\,0,\,0)+\frac{\tau_{ij,\,kl}M^2}{4\beta^2\nu}. \tag{П. 1}$$

Здесь

$$\begin{aligned}\tau_{ij,\,kl}=&-\left(\frac{N}{2V_0}\delta_{ij}-\Lambda_{ij}\right)\left(\frac{N}{2V_0}\delta_{kl}-\Lambda_{kl}\right)\sigma_3'-\left(\frac{N}{2V_0}\delta_{ij}-\Lambda_{ij}\right)\frac{\nu\Lambda_{kl}''-3\nu'\Lambda_{kl}'}{\nu^3}-\\&-\left(\frac{N}{2\nu_0}\delta_{kl}-\Lambda_{kl}\right)\frac{\nu\Lambda_{ij}''-3\nu'\Lambda_{ij}'}{\nu^3}+\frac{1}{\nu^2}\,[\nu\,(\Lambda_{ij}'\delta_{kl}+\Lambda_{kl}'\delta_{ij})-\nu'\,(\Lambda_{ij}\delta_{kl}+\Lambda_{kl}\delta_{ij})+\\&+2\Lambda_{ij}'\Lambda_{kl}'+\nu'Z_{ij,\,kl}'-\nu Z_{ij,\,kl}'']+2\nu\,(p_{ij}\delta_{kl}+p_{kl}\delta_{ij}+p_{ij,\,kl}),\end{aligned} \tag{П. 2}$$

где

$$\begin{gathered}\Lambda_{ij}\equiv\Lambda_{ij}(\eta_0),\quad Z_{ij,\,kl}\equiv Z_{ij,\,kl}(\eta_0),\\ \Lambda_{ij}(\varepsilon)=\langle\delta\,(\varepsilon-\varepsilon\,(\mathbf{p}))\,\Lambda_{ij}(\mathbf{p})\rangle,\\ Z_{ii,\,kl}(\varepsilon)=\langle\delta\,(\varepsilon-\varepsilon\,(\mathbf{p}))\,\Lambda_{ij}(\mathbf{p})\,\Lambda_{kl}(\mathbf{p})\rangle.\end{gathered} \tag{П. 3}$$

Литература

[1] *Вонсовский С. В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
[2] *Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В.* Спиновые волны. М.: Наука, 1967.
[3] *Hopfield J. J.* Phys. Lett., 1968, vol. 27A, N 6, p. 397—399.
[4] *Knapp G. S., Corenzwit E., Chu C. W.* Sol. St. Commun., 1970, vol. 8, N 8, p. 639—641.
[5] *Kim D. J.* Phys. Rev. B, 1982, vol. 25, N 11, p. 6919—6938; *Kim D. J., Tanaka C.* JMMM, 1986, vol. 58, p. 254—264.

[6] *Зверев В. М., Силин В. П.* Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 45, № 4, с. 178—180; Кр. сообщ. по физике (ФИАН), 1987, № 2, с. 48—51; ЖЭТФ, 1987, т. 93, № 2 (8), с. 709—722.
[7] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1974, ч. I, с. 224—226.
[8] *Новикова С. И.* Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974, с. 16—26, 32—34.
[9] *Силин В. П.* ЖЭТФ, 1960, т. 38, № 8, с. 977—983.
[10] *Edwards D. M., Wohlfarth E. P.* Proc. Roy. Soc., 1968, vol. A303, N 1472, p. 127—137.
[11] *Haush G., Warlimont H.* Acta Metallurgica, 1973, vol. 21, p. 401—414.
[12] *Haush G.* Phys. St. Sol. (a), 1973, vol. 18, p. 735—740.
[13] *Chikazumi S.* J. Magn. and Magn. Mater., 1979, vol. 10, p. 113—119.
[14] *Jnoue J., Shimizu M.* Phys. Lett., 1982, vol. 90A, N 1—2, p. 85—88.
[15] *Shimizu M.* Rept. Prog. Phys., 1981, vol. 44, N 4, p. 329—409.
[16] *Crangle J., Hallem G. C.* Proc. Roy. Soc., 1963, vol. 272, N 1348, p. 119—132.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
4 сентября 1987 г.
В окончательной редакции
23 декабря 1987 г.