

Механизм гигантского магнетосопротивления интерметаллидов редкоземельных ионов и актинидов

© А.И. Мицек, В.А. Мицек, В.Н. Пушкарь

Институт металлофизики Академии наук Украины,
252142 Киев, Украина

(Поступила в Редакцию 3 марта 1997 г.)

Гигантское положительное или отрицательное магнетосопротивление (МЭС) рассчитывается в зонной модели. Спектры зонных электронов в антиферромагнитном двухподрешеточном интерметаллиде зависят от вектора антиферромагнетизма $\mathbf{L}(T, \mathbf{H})$. При метамагнитном переходе в ферромагнитную фазу появляются расщепление по спину σ , сдвиг полос энергий и уменьшение эффективности масс зонных электронов. Этот механизм отрицательного гигантского МЭС сопровождается также ростом времени релаксации $\tau_{j\sigma}$. В качестве основного механизма релаксации рассматривается рассеяние на флуктуациях химической связи. Положительное МЭС получается в четырехподрешеточной модели $4f$ - или $5f$ -интерметаллидов. Эффективные массы электронов (j, σ)-зон $m_{j\sigma}(J_{IT})$ растут при увеличении среднего момента $J_{IT}(T, \mathbf{H})$ иона j -подрешетки $4(5)f$ -ионов. Рассчитаны термодинамика такой четырехподрешеточной модели, нелинейные кривые намагничивания и МЭС, немонотонная зависимость теплоемкости $C_m(T, \mathbf{H})$ от поля \mathbf{H} .

1. Волновые функции

Кинетические свойства магнетиков отражают особенности их электронных спектров и процессов рассеяния электронов проводимости. Процессы рассеяния определяются дефектами атомной и спиновой решеток, а также спектрами квазичастиц, участвующих в процессах рассеяния. Рассеяние электронов возрастает в окрестностях переходов первого рода, где резко увеличивается концентрация, например, магнитных дефектов (доменных стенок, вихрей и т. п.). Однако в области стабильности разных магнитных фаз кристалла различие в их электросопротивлениях ($\rho(T, \mathbf{H})$) при температуре T в магнитном поле \mathbf{H} должно определяться различием в их электронных спектрах. В частности, гигантское магнетосопротивление (МЭС) при метамагнитном переходе связано с различием спектров электронов в антиферро- (АФМ) и ферромагнитной (ФМ) фазах.

Проблема носит достаточно общий характер, поскольку в магнитном поле \mathbf{H} изменяются также состав магнитных дефектов и спектры квазичастиц, как магнонов, так и фононов и т.п. Здесь мы ограничимся случаем низкотемпературных ($T_N \sim 10$ К) интерметаллидов с высоким ЭС $\rho \sim 10^{-5} \Omega \cdot \text{см}$. Наибольший интерес представляет анализ предельных случаев как большого отрицательного МЭС $\Delta\rho(T, \mathbf{H})/\rho(T, 0) \sim -1$, так и большого положительного ($\sim +1$) [1]. Отрицательное МЭС наблюдается при метамагнитном переходе АФМ \rightarrow ФМ в редкоземельных (RE) и урановых интерметаллидах. Большая величина МЭС при низких температурах наблюдается как в $4f$ - и $5f$ -соединениях с большим ЭС, так и в неоднородных (сверхрешетках, кластерных сплавах) $3d$ -магнетиках с довольно низким ЭС. Общим для всех систем с гигантским МЭС является переход из скомпенсированного магнитного состояния в фазу ФМ-насыщения (см. [2]). Метамагнитный переход оказывается частным случаем.

Интерпретация экспериментальных данных по исследованию МЭС даже на феноменологическом уровне [3]

не может обойтись без предположения об изменении электронного спектра в поле. Однако наличие многих параметров, характеризующих разные спиновые подзоны электронов проводимости, делают феноменологическую интерпретацию малоинформативной.

Экспериментальная картина кинетических свойств (ЭС и МЭС) АФМ-металлов, интерметаллидов и сплавов неоднозначно связана с типом спинового порядка. Наблюдается как увеличение, так и уменьшение ЭС при АФМ-упорядочении. Зонная теория носителей заряда развивается нами с целью классифицировать наблюдаемые эффекты. Отметим, что общая теория атомного [4] и спинового [5] порядка предполагается уменьшение ЭС $\rho(T)$ при упорядочении, при $T < T_c, T_N, \dots$. Эксперимент такую однозначность опровергает.

Предельный случай резкого падения ЭС $\rho(T)$ ниже T_N наблюдается в $5f$ -интерметаллидах $U_2M_3Si_5$ [6], $M = \text{Co, Rh, Ru}$. Особенно интересен случай $M = \text{Rh}$ при $T < T_N = 25$ К. Та же тенденция ЭС $\rho(T)$ в $5f$ -метамагнетиках типа $UNiGa$ [7], а также $\rho_a(T)$ в $UPdIn$ вдоль оси \mathbf{a} кристалла [8]. Низкие значения температуры полиморфных превращений решеток $4f$ - и $5f$ -соединений позволяют предположить существенную роль флуктуаций химических связей (ФХС) в механизмах релаксации зонных электронов.

Достаточно часто наблюдается и противоположная тенденция $\rho(T)$. Отметим максимум ЭС $\rho(T)$ в окрестности T_N АФМ $4f$ -металлов [9]. Резкий рост ЭС при обратном температурном метамагнитном переходе (ФМ \rightarrow АФМ) при $T < T_S = 310$ К наблюдается в $FeRh$ [10,11]. Рост ЭС в АФМ-фазе метамагнетика $(Mn-Co)_2S$ наблюдался в [12]. Прямой метамагнитный переход (АФМ \rightarrow ФМ) в нем уменьшает ЭС $\rho(T, \mathbf{H})$ на $\sim 10\%$, когда критическое поле $H_{MM} \sim 1$ Т разрушает АФМ-порядок. Поскольку высокополезная ФМ-фаза имеет существенно меньшее ЭС (на величину $\sim 10-100\%$), эффект получил название "гигантского" отрицательного МЭС (см. [2,10-12]). Наибольшее внимание привлекает

наблюдение этого эффекта в 3*d*- и 4*f*-сверхрешетках [2], в которых чередующиеся ФМ-слои, разделенные слоями неферромагнитного (АФМ и т. п.) металла, имеют антипараллельные намагниченности \mathbf{M}_j . Авторы [12] показали также, что метамагнитный переход при $H > H_{MM}$ полностью снимает аномальный рост $\rho(T, \mathbf{H})$ при $T < T_N$.

В пользу "метамагнитной природы" гигантского МЭС свидетельствует и наблюдение этого эффекта в нанокристаллических лентах суперпарамагнитного сплава $\text{Cu}_{92}\text{Co}_8$ при его магнитном насыщении [13]. Наложение разных эффектов наблюдается в разбавленном интерметаллиде $(\text{Fe}_{1-x}\text{V}_x)_3\text{Si}$ [14]; в частности, при $x \gtrsim 0.1$ появляется максимум $\rho(T)$ при температурах ниже T_N .

Обсуждаемые АФМ-системы ионов разбиты на *j*-подрешетки. Носители заряда предполагаем гибридирированными и описываем Ферми-амплитудами $f_{jr\sigma}$. Для ковалентных электронов, принадлежащих (*j, r*)-ионам, используем волновые функции

$$\Psi_{jr} = \sum_n \hat{D}_{jr} \Psi_0, \quad \hat{D}_{jr} = \{c_{jr\sigma} d_{jr\sigma}^n\},$$

$$d_{jr\sigma}^n = \prod_{\mu=1}^n a_{jr\mu\sigma}^+, (d_Q)^+ = d_Q^-, \quad (1)$$

линейные по многоэлектронным операторным спинорам (МЭОС). В фактор Ψ_0 включена волновая функция магнитных локализованных электронов, образующих угловой момент \mathbf{J}_{jr} иона. На Ферми-операторы $a_{jr\mu\sigma}^+$ и МЭОС \hat{D} накладываем условия локальности

$$n_{Q\mu} = a_{Q\mu}^+ a_{Q\mu} = 1 = d_{Q\mu}^n \bar{d}_{Q\mu}^n = \hat{D}_{jr}^n \hat{D}_{jr}^n$$

$$= \sum_{\sigma} |c_{Q\sigma}|^2, \quad Q = (jr\sigma). \quad (2)$$

Четность числа ковалентных электронов *n* однозначно определяет пространства Фока для МЭОС: симметричное для четного *n*

$$[d_{jr\sigma}^n d_{j'r'\sigma'}]_{\mp} = \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad d_{jr\sigma} = d_{j0\sigma} + \sum_k d_{jk\sigma} e^{ikr} \quad (3)$$

и знак (−) для коммутатора (3), или антисимметричное для нечетного *n* и знак (+) для коммутатора. Представление (1)–(3) позволяет решить квазихимическую задачу устойчивости атомных решеток в замкнутой форме [15].

Общие принципы квантовой теории позволяют использовать гамильтонианы, бинарные по f_a^+ или МЭОС \hat{D} . Полагаем $n = 1$ и опускаем этот индекс. Разделение связей на металлические и ковалентные позволяет не рассматривать смешанные гамильтонианы. Операторы c_Q действуют в спиновом пространстве

$$c_Q = [(1 + \sigma s_{jr})/2]^{1/2}, \quad (4)$$

где σ — матрицы Паули, s_{jr} — спин ковалентных электронов (*j, r*)-узла.

Связи параметров A_{ij} косвенного обменного взаимодействия с параметрами Γ_{ij} ковалентной связи устанавливаются в разделе 2. Здесь же рассчитываются спектры ФХС и корреляторы МЭОС в четырехподрешеточной модели. Модель позволяет учесть двойной (и более сложный) косвенный обмен через немагнитные ионы. Зонные спектры носителей заряда в четырехподрешеточном интерметаллиде рассчитываются в разделе 3. В модели пар RE–Ni-подрешеток (спин $S_{Ni} \ll J_{RE}$) показывается сильная зависимость положения (*j, σ*)-полос энергий электронов и их эффективных масс $m_{j\sigma}$ от средних моментов \mathbf{J}_{JT} редкоземельных (RE) ионов. Термодинамические характеристики этой модели (раздел 4) обнаруживают сильные нелинейности (перегибы) намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ и немонотонности теплоемкости $C_m(\mathbf{H})$ в поле $H \sim H_{OM}$, где H_{OM} — характеристическое поле обменной связи RE–Ni.

Преобладание ковалентной связи обуславливает важнейшую роль рассеяния электронов на ФХС в процессе релаксации. Рассчитанные времена релаксации $\tau_{j\sigma}$ зонных электронов (раздел 5) также зависят от \mathbf{J}_{JT} . Один из главных источников этой зависимости — увеличение масс $m_{j\sigma}(\mathbf{J}_{JT})$ при увеличении $\mathbf{J}_{JT}(T, \mathbf{H})$. С ним связаны увеличение $\tau_{j\sigma}^{-1}$ и изменение парциальных чисел электронов (*j, σ*)-подзон. Совокупность этих эффектов приводит к гигантскому МЭС $\Delta R(T, \mathbf{H}) > 0$. Противоположный эффект (МЭС $\Delta R < 0$) получается в двухподрешеточной АФМ-модели, где все кинетические характеристики, входящие в формулу Друде для ЭС, зависят от АФМ-вектора $\mathbf{L}(T, \mathbf{H})$. Анализ эффектов и сравнение с экспериментом даются в разделе 6. Обсуждение адекватности теории приводится в разделе 7.

2. Ковалентная связь. Энергия обменного взаимодействия между подрешетками. Флуктуации химической связи

Редкоземельные (RE) многоподрешеточные интерметаллиды, содержащие три и более атомных компонента, являются часто плохими металлами с высоким ЭС $\rho(T) \sim 10^{-5} \Omega \cdot \text{см}$ даже при низких $T < T_N$ [1]. Аналогичные кинетические свойства проявляют соединения актинидов [6–8]. Они интересны нелинейными магнитными, магнитоэлектрическими и др. свойствами. Эта нелинейность обусловлена разными причинами, в частности магнитной неоднородностью (кластерной структурой [16,17]). Здесь мы предлагаем еще одну нелинейную, многоподрешеточную, модель. Ее нелинейное поведение в магнитном поле имитирует метамагнетизм.

Можно полагать, что большое ЭС связано, в частности, с малой плотностью Ферми-газа электронов проводимости. Мала их энергия Ферми ($\varepsilon_F \leq 1 \text{ eV}$). Основная часть 4*s*- и 6*s*-, а также 3*d*- и 5*d*-электронов металлических (3*d*- и 4*f*-) ионов идет на ковалентную связь с Si-ионами и между собой (рис. 1). Металлическая

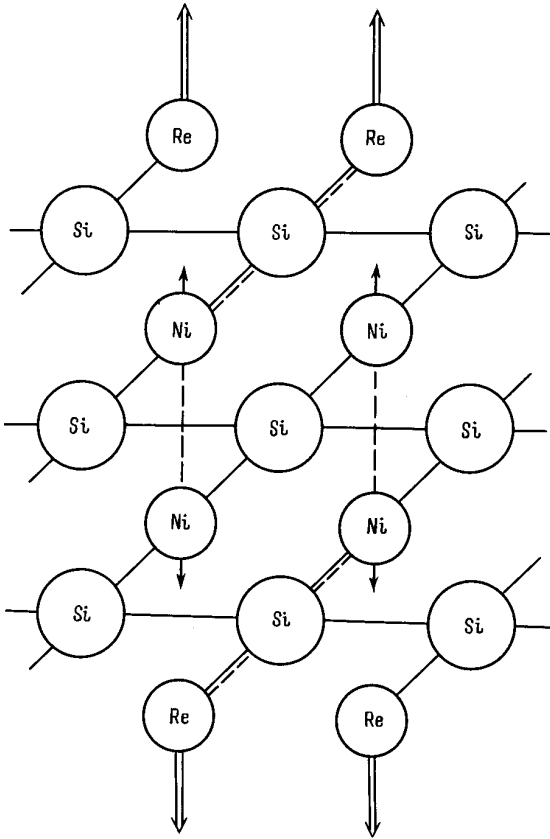


Рис. 1. Слоистая подрешеточная модель редкоземельного (RE) интерметаллида $\text{RE}_2\text{Ni}_3\text{Si}_5$ ($\text{RE} = \text{Tb}, \text{Sm}, \text{Gd}, \dots$). Угловые моменты \mathbf{J}_{JR} RE-ионов показаны двойными стрелками, спины ионов Ni-одинарными.

связь играет подчиненную роль. Точно также можно не учитывать в первом приближении косвенный обмен между $3d$ - и $4f$ -ионами через электроны проводимости. Однако s - d - (и s - f -) обмен играет важную роль в зонных электронных спектрах. Его вклады в энергии зонных спектров $A_{s-d} \sim 1 \text{ eV} \gtrsim \varepsilon_F$, что существенно для перераспределения электронов по (j, σ) -зонам при намагничивании.

Косвенный обмен между магнитными ионами рассчитываем в представлении МЭОС [18]. Полагая, что в каждой связи участвует один ковалентный электрон ($n = 1$), используем (1)–(4) для магнитных ионов и МЭОС $p_{r\sigma}$ для Si. Не рассматриваем двойной и т.п. обмен через Si^{4+} , пренебрегаем спиновой поляризацией этих ионов, спуская спиновый индекс σ . Согласно рис. 1, мы рассматриваем взаимодействия внутри Ni-подрешетки ($j = 2$) и между RE(1)- и Ni-подрешетками. Доминирующими считаем взаимодействия Si-Si (p - p), а также Si-Ni (p - 2). Квазихимическую (ковалентную) энергию связи рассматриваем в билинейной по МЭОС форме

$$\mathcal{H}^{\text{ch}} = - \sum \Gamma^{ij} (|\mathbf{r} - \mathbf{R}|) \hat{D}_{i\mathbf{r}} \hat{D}_{j\mathbf{R}} - \sum (\Gamma^{jp} \hat{D}_{j\mathbf{r}} \bar{p}_{\mathbf{R}} + H.c.) - \sum \Gamma^{pp} p_{\mathbf{r}} \bar{p}_{\mathbf{R}}. \quad (5)$$

Самой сильной полагаем ковалентную связь Si-Si ($\Gamma^{pp} \gg |\Gamma^{ij}|$). Следующими по порядку малости считаем параметры Γ^{jp} и далее параметры взаимодействия Γ^{ij} ионов металлов. Соответственно для расчетов спектров ФХС важны два последних члена гамильтониана (5). Обменные (спиновые) гамильтонианы получаются из первого члена (5). Общая форма спинорного представления Дирака для волновых функций (1), (4) в линейной по спину $s_{j\mathbf{r}}$ форме позволяет представить обменные гамильтонианы в виде разложений по степеням $s_{j\mathbf{r}}$.

Вариационный метод [18] дает

$$s_{j\mathbf{r}} = (A_j(Q_j) \mathbf{S}_{j\mathbf{r}}), \quad \mathbf{S}_{j\mathbf{r}} = (g_j - 1) \mathbf{J}_{j\mathbf{r}}, \quad (6)$$

где A_j — параметр обмена между ковалентными и магнитными электронами ($j\mathbf{r}$)-иона, Q_j — линейная комбинация кулоновских параметров (в представлении Андерсона-Хаббарда) того же иона, $\mathbf{S}_{j\mathbf{r}}$ и $\mathbf{J}_{j\mathbf{r}}$ — спиновые и угловые моменты $4f$ - и $3d$ -ионов ($g_{3d} \cong 2$). Разлагаем (5) в ряды по $s_{j\mathbf{r}}$. После операции вычисления шпура ($\text{Sp}_{\sigma} \dots$) остаются только билинейные по $\mathbf{S}_{j\mathbf{r}}$ члены

$$\mathcal{H}^{\text{ex}} = - \sum B_{ij} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \mathbf{S}_{i\mathbf{r}} \mathbf{S}_{j\mathbf{r}'} - \dots, \quad B_{22} = \frac{1}{8} \Gamma^{22} (A_2/Q_2)^2 < 0. \quad (7)$$

Выполнение неравенства (7) необходимо для АФМ-упорядочения соседних ионов Ni. Для соседних RE и Ni ионов имеем обменный параметр

$$A_{12} = B_{12} (|\mathbf{r} - \mathbf{R}|) (g_j - 1),$$

$$B_{12} = \Gamma^{12} (A_1 A_2 / Q_1 Q_2) / 8, \quad |B_{12}| \ll |B_{22}|, \quad (7a)$$

знак которого не играет принципиальной роли. Выбираем $A_{12} > 0$. Вводим результирующий момент пары ионов соседних подрешеток RE и Ni

$$J_{1,2} = \pm (J_{\text{RE}} + S_{\text{Ni}}), \quad S_{\text{Ni}} \leq 1, \quad J_{\text{RE}} \gg 1. \quad (7b)$$

Его величина с точностью $\sim 10\%$ определяется моментами ионов $\text{RE} = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Sm}, \dots$. Теперь в термодинамических расчетах сводим четырехподрешеточную систему к двухподрешеточной с моментами $\mathbf{J}_{j\mathbf{r}}$ (7b) и их средними \mathbf{J}_{jT} для j -подрешеток ($j = 1$ и 2).

Обменные параметры B_{ij} при $T \neq 0$ умножаются на бинарные корреляторы МЭОС (1). При высоких $T_N \sim T_0 \sim 10^2 - 10^3 \text{ K}$, где T_0 — температура полиморфизма, следует учитывать прямое влияние ФХС на обменные параметры. По аналогии с магнетитами разделяем тепловые и "нулевые" ФХС. Кинетика интерметаллидов может сильно зависеть от ФХС, особенно, в сложных решетках с высокой концентрацией точечных дефектов. Вводим постоянные числа j -ионов N_j и неоднородные

части $P_j(r)$ их распределений

$$\sum_{3j} e^{i\mathbf{k}r_j} = N_j \{ \delta_{\mathbf{k}0} + P_j(\mathbf{k}) \},$$

$$P_1(\mathbf{k}) = -P_2(\mathbf{k}) = -P(\mathbf{k}), \quad (8)$$

которые учитывают перестановки (миграцию) $\text{Re} \leftrightarrow \text{Ni}$. Соотношения коммутации МЭОС в \mathbf{k} -представлении

$$[d_{j\mathbf{k}}, \bar{d}_{j\mathbf{q}}]_+ = [\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + (-1)^j P(\mathbf{k} - \mathbf{q})] / N_j, \quad j = 1, 2;$$

$$[f_{\Gamma}^+ f_{\Gamma'}]_+ = \delta_{\Gamma\Gamma'} \quad (8a)$$

отличаются от соотношений коммутации Ферми для зонных электронов.

Из (5) получаем гамильтониан ФХС

$$\mathcal{H}^{\text{ch}} = \mathcal{H}_0^{\text{ch}} + \sum \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp} p_{\mathbf{k}} \bar{p}_{\mathbf{k}} + \sum (\Gamma_{\mathbf{k}}^{jp} d_{j\mathbf{k}} \bar{p}_{\mathbf{k}} + \text{H.c.})$$

$$+ \sum \left\{ \Gamma_q^{12} [\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + P(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \delta_{1\mathbf{k}} \delta_{2\mathbf{q}} + \text{H.c.} \right\} + \dots, \quad (9)$$

где

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^{ij} = \Gamma^{ij}(0) - \Gamma^{ij}(\mathbf{k}) \cong \Gamma_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{l}} \Gamma_{ij}(|\mathbf{l}|) e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (9a)$$

Параметры стабильности решетки [15]

$$\rho_{ij} = \langle d_{i0} \bar{d}_{j0} \rangle, \quad \rho_{jj} = 1 - \sum_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} P_j(\mathbf{k} - \mathbf{q}) N_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{jj} \quad (9b)$$

выражаются через корреляторы ФХС

$$N_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{ij} = \langle d_{i\mathbf{k}} \bar{d}_{j\mathbf{q}} \rangle,$$

$$G_{\mathbf{q}\mathbf{k}}^{ij} = \langle \langle \bar{d}_{i\mathbf{q}} | d_{j\mathbf{k}} \rangle \rangle \cong [\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + P_i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta_{ij}] G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{ij}. \quad (10)$$

Вводим двухвременные функции Грина (10). Уравнения движения для них

$$\begin{pmatrix} E - \Gamma_{\mathbf{k}}^{11} & -\Gamma_{\mathbf{k}}^{12} & -\Gamma_{\mathbf{k}}^{p2} \\ -\Gamma_{\mathbf{k}}^{*12} & E - \Gamma_{\mathbf{k}}^{22} & 0 \\ -\Gamma_{\mathbf{k}}^{*p2} & 0 & E - \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{22} \\ G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{12} \\ G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{p2} \end{pmatrix} = \frac{1}{N_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \widehat{\text{Int}}$$

$$(11)$$

при малых $\Gamma^{jj} \rightarrow 0$ (для $j = 1, 2$) без учета интегральных членов $\widehat{\text{Int}}$ (см. раздел 5) имеет вид, например,

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{22} = (E - \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp}) / N_2 \Delta_2, \quad \Delta_2 = E(E - \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp}) - \gamma_{\mathbf{k}}^2,$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}^2 = |\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{12}|^2 + |\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{p2}|^2. \quad (11a)$$

Спектр ФХС получаем из уравнения $\Delta_2 = 0$ в виде двух ветвей

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+ \cong \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-, \quad \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^- \cong -\gamma_{\mathbf{k}}^{pp} / \Gamma_{\mathbf{k}}^{pp} < 0,$$

$$\xi = |\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-| / |\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+| \ll 1, \quad (12)$$

причем знак нижней ветви $(-)$ означает наличие "нулевых" ФХС, аналогичных "нулевым" магнонам, и уменьшение параметров стабильности (9b) при $T = 0$. Корреляторы ФХС для Ni(2)- и RE(1)-подрешеток

$$N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{22} \cong \left\{ (1 - \xi) [1 - n_F(|\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-|)] + \xi n_F(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+) \right\} / N_2,$$

$$N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{11} \cong 1 / (2N_1),$$

$$N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{12} \cong \left\{ -\frac{1}{2} + n_F(|\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-|) \right\} = -N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{21},$$

$$n_F(E) = (e^{\beta E} + 1)^{-1}, \quad \beta = 1/k_B T. \quad (13)$$

Наличие $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-$ -ветви ФХС (12) понижает температуры полиморфных переходов T_{p2} , поскольку энтропия ФХС высока. Главный вклад в свободную энергию Φ ФХС вносят корреляторы типа $N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{p2}$

$$\Phi_{p2}^{CBF} \cong (|\Gamma_{p2}|^2 / \Gamma_{pp}) \alpha_{5/2} (T / T_{p2})^{5/2}, \quad \Gamma_{\mathbf{k}}^{ij} \cong \Gamma_{ij} \mathbf{k}^2,$$

$$T_{p2} = |\Gamma_{p2}|^2 / \Gamma_{pp} k_B \ll T_{pp} = \Gamma_{pp} / k_B \sim 10^3 \text{ K}. \quad (14)$$

При $\Gamma_{p2} \sim 0.1 \text{ eV}$ получаем согласующиеся с экспериментальными фазовыми диаграммами RE-интерметаллидов [9] температуры $T_{p2} \sim 10^2 \text{ K}$.

3. Спектры электронов проводимости в $s-f$ -модели

В многоподрешеточных интерметаллидах основными являются перескоки электронов между ионами разных подрешеток. Влияние $s-f$ -обменных взаимодействий на зонные спектры (эффективные энергии Ферми $\varepsilon_{Fj\sigma}$) приводит к разным их зависимостям от моментов $\mathbf{J}_{j\mathbf{R}}$ и спинов $\mathbf{S}_{j\mathbf{R}}$ для двух и четырех подрешеток.

1) Рассмотрим сначала однозначный АФМ-случай двух подрешеток. Предполагаем далее, что гибридизация зонных и ковалентных электронов учтена (независимо от $s-f$ -обмена), и используем разделенные гамильтонианы (9) и \mathcal{H}^{el}

$$\mathcal{H}^{\text{el}} = - \sum t_{ij} f_{i\sigma}^+ f_{j\sigma} - \varepsilon_F \sum n_{j\mathbf{k}\sigma}$$

$$- \sum A_{s-f} (\boldsymbol{\sigma}_{j\mathbf{R}\sigma} \mathbf{J}_{j\mathbf{R}\sigma}). \quad (15)$$

В \mathbf{k} -представлении для одинаковых ионов разных магнитных подрешеток

$$\mathcal{H}^{\text{el}} = \mathcal{H}_0^{\text{el}} + \sum \tilde{\varepsilon}_{j\mathbf{k}\sigma} n_{j\mathbf{k}\sigma}$$

$$- \sum [t(\mathbf{k}) f_{1\mathbf{k}\sigma}^+ f_{2\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}], \quad n_{\Gamma} = f_{\Gamma}^+ f_{\Gamma}, \quad (15a)$$

где

$$\sigma_{j\mathbf{r}\sigma}^z = \sum_{\sigma} \sigma n_{j\mathbf{k}\sigma}, \quad \tilde{\varepsilon}_{j\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{Fj\sigma}, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = t_{jj}(0) - t_{jj}(\mathbf{k}),$$

$$t(\mathbf{k}) = \sum t(\mathbf{l}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad \varepsilon_{Fj\sigma} = \varepsilon_F - \sigma (-1)^j \tilde{A}_2,$$

$$\tilde{A}_2 = A_{s-f} J_T, \quad J_{1T} = -J_{2T} = J_T. \quad (15b)$$

Электронные двухвременные функции Грина

$$F_{\mathbf{k}\sigma}^{ij} = \langle\langle f_{i\mathbf{k}\sigma} | f_{j\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle, \dots \quad (16)$$

рассчитываем из их уравнений движения

$$\begin{pmatrix} E - \tilde{\varepsilon}_{1\mathbf{k}\sigma} & t(\mathbf{k}) \\ t^*(\mathbf{k}) & E - \tilde{\varepsilon}_{2\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{\mathbf{k}\sigma}^{11} \\ F_{\mathbf{k}\sigma}^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{Int}_1 \\ \text{Int}_2 \end{pmatrix}. \quad (16a)$$

Интегральные члены справа в (16a) учитывают, в частности, рассеяния на квазичастицах, например, ФХС (см. раздел 5).

Из дисперсионного уравнения матрицы (16a) получаем две ветви Ферми-квазичастиц

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{\pm} = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\pm}(\sigma) \pm [(\tilde{A}_2 L)^2 + |t(\mathbf{k})|^2]^{1/2}, \\ \sigma = \pm 1, \quad \tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \varepsilon_F, \quad (17)$$

где

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\pm} = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + \sigma \tilde{A}_2 \mathbf{M}(T, \mathbf{H}), \quad \mathbf{M}(T, \mathbf{H}) = (\mathbf{J}_{1T} + \mathbf{J}_{2T})/2J_T, \\ \mathbf{L} = (\mathbf{J}_{1T} - \mathbf{J}_{2T})/2J_T.$$

При $H = 0$ имеем намагниченность $M = 0$ и $L = 1$. Вырождение по спину σ снято. При метамагнитном переходе

$$H > H_{MM}, \quad M \rightarrow 1, \quad L \rightarrow 0 \quad (18)$$

меняется топология поверхностей Ферми (эффективные массы $m_{\sigma j}$) и появляется расщепление по σ . Большие ЭС и малые числа зонных электронов $n_{el} \sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ позволяют рассматривать случай низких $\varepsilon_F \ll t(0) = t_0$ и квадратичного закона дисперсии.

В фазе магнитного насыщения (ФМ) (18) массы σ -подзон одинаковы

$$m_{\pm} = m_{12}/(\mu \pm 1), \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m_{11}, \\ |t(\mathbf{k})| = t_0 - \mathbf{k}^2/2m_{12}, \quad \mu = m_{12}/m_{11}; \quad (19)$$

добавочное (+, -)-расщепление обусловлено учетом двух координационных сфер ионов. В исходной ($\mathbf{H} = 0$) АФМ-фазе

$$m_{\pm}(T, \mathbf{H}) = Q_L m_{12}, \quad Q_L = K/(1 \mp \mu K), \quad (20)$$

где

$$K(T, \mathbf{H}) = \left\{ 1 + [J_{A_{s-f}} L(T, \mathbf{H})/t_0]^2 \right\}, \quad (20a)$$

имеется сильная зависимость эффективных масс (+, -)-подзон от T и \mathbf{H} . Она характеризуется коэффициентом увеличений массы $K(T, \mathbf{H})$ при $T < T_N$. Различие (19) и (20) при $(K - 1) \gg 0.1$ является очевидным механизмом (одним из возможных) "гигантского" МЭС при метамагнитном переходе.

2) Зонный спектр четырехподрешеточного интерметаллида (рис. 1) рассчитываем аналогично. Учитываем только перескоки электронов между металлическими

ионами, т.е. четыре типа (j, σ)-узлов. Индексы $j = 1$ и 2 используем для RE-ионов с моментами $\mathbf{J}_{1R} \uparrow \downarrow \mathbf{J}_{2R'}$. Ионы Ni ($j = 3$ и 4) спарены с RE-ионами той же четности. При расчете магнитных свойств (см. раздел 4) это позволяет свести проблему к задаче двух подрешеток с моментами $\mathbf{L}_1 = (\mathbf{J}_{1R} + \mathbf{S}_{3r})$ и $\mathbf{L}_2 = (\mathbf{J}_{2R} + \mathbf{S}_{4r})$. Можно рассмотреть и более общую (гораздо более громоздкую) модель с учетом большего числа типов перескоков между узлами. Получаем более общие результаты, зависящие от большего числа параметров.

Уравнения движения распадаются на две пары перескоков RE-Ni внутри приведенных j -подрешеток ($j = 1$ и 2). Гамильтониан имеет вид (15) при

$$t_{11} = t_{22}, \quad t_{33} = t_{44}, \quad t_{13} = t_{24} = t(\mathbf{k}), \\ \tilde{A}_{4+}^{(j)} = -(-1)^j (A_{s-f} J_{jT} + A_{s-d} S_{j+2,T}). \quad (21)$$

В дальнейшем можно пренебречь S_{jT} . Полученные пары Ферми-ветвей в АФМ-фазе (при $\mathbf{H} = 0$) вырождены по σ . Включение поля \mathbf{H} и появление намагниченности \mathbf{M} (17) снимают это вырождение. В результате получаем восемь ветвей спектра

$$E_{\mathbf{k}\sigma q}^{\pm} = \left\{ \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma q} \pm [\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma q}^2 + |t(\mathbf{k})|^2]^{1/2} \right\} / 2, \quad q = 1, 2, \quad (22)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma q} = \tilde{\varepsilon}_{q\mathbf{k}} \pm \varepsilon_{q+2, q+2, \mathbf{k}} + (-1)^q \sigma (A_{s-f} J_{qT} \pm A_{s-d} S_{q+2,T}), \\ \tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \varepsilon_F, \quad \varepsilon_{q\mathbf{k}} = t_{q\mathbf{k}}(0) - t_{q\mathbf{k}}(\mathbf{k}). \quad (22a)$$

Эффективные массы $m_{j\sigma\pm}(T, \mathbf{H})$ в АФМ-фазе получают аналогичные (20) коэффициенты увеличения. Имеем из (22)

$$(m_{1,2}^{-1})_{\sigma\pm} = (m_{11}^{-1} + m_{33}^{-1}) \mp K_{1,2}^{-1} \\ \times \left\{ (m_{11}^{-1} + m_{33}^{-1}) \varphi_{1,2} \sigma + m_{13}^{-1} \right\}, \quad (23)$$

где

$$K_{1,2} = (1 + \varphi_{1,2}^2)^{1/2}, \quad \varphi_{1,2} = \tilde{A}_4^{1,2}/t_0 \cong A_{s-f} J_{jT}/t_0. \quad (23a)$$

Когда доминируют перескоки RE-Ni ($|m_{13}| \ll |m_{jj}|$), расщепленные по σ мало, и коэффициенты увеличения

$$K_{1,2}(T, \mathbf{H}) \cong [1 + (A_{s-f}/t_0)^2 J_{1,2,T}^2]^{1/2} \quad (23b)$$

меняются противоположным образом: K_1 растет, а K_2 уменьшается в поле.

4. Термодинамика четырехподрешеточного интерметаллида в поле H_z

В слоистой структуре (RE)₂Ni₃Si₅ слои RE-ионов разделены слоями ионов Ni и Si. Близкие $T_N \cong 10$ К для разных ионов RE = Tb, Sm, Gd и Y [1] позволяют предположить, что наибольшее обменное взаимодействие

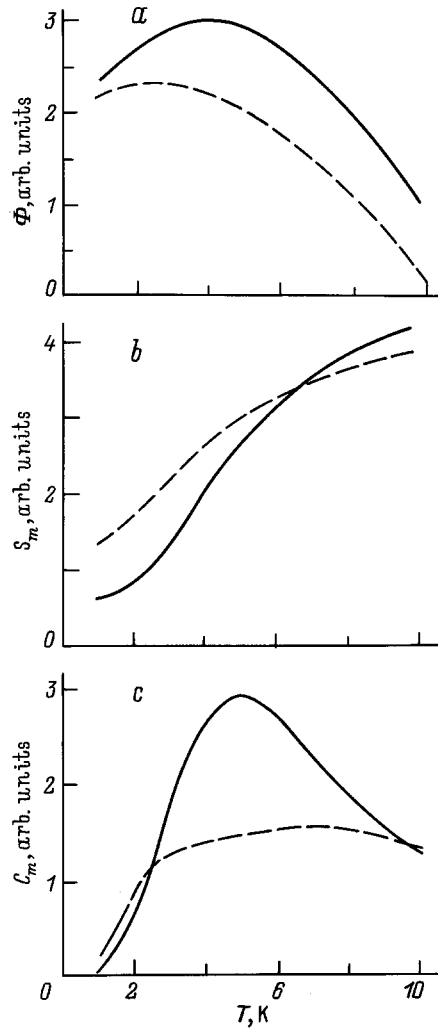


Рис. 2. Зависимости от температуры T термодинамического потенциала $\Phi(T)$ (a), магнитной части энтропии S_m (b) и магнитной теплоемкости C_m (единицы относительные) (c), рассчитанные для четырехподрешеточного интерметаллида. $H = 0$ (сплошная линия) и $3T$ (штриховая линия).

имеется между подрешетками 3 и 4. Малый магнитный момент ионов Ni (авторы [1]) оценили его $\sim 0.2\mu_B$ не вносит заметного вклада в \mathbf{M} и \mathbf{L} (17). В представлении $|J_m\rangle$ методом ван Флека основными являются гамильтонианы RE-ионов (1,2)-подрешеток: в симметричном поле $H = H_z$ ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{H}_A$ — полю анизотропии)

$$\mathcal{H}_j = -\tilde{A}S_T J_{jr}^z - k(J_{jr}^z)^2 + (-1)^j \mu_J H J_{jr}^z, \quad \mu_J = g_J \mu_B, \quad j = 1, 2. \quad (24)$$

$$E_{jm} = \mathcal{H}_{jmm} = -\{km^2 + (A \pm \mu_J H)m\}, \quad A = \tilde{A}S_T, \quad j = 1, 2. \quad (25)$$

Парциальные статистические суммы Z_j при $T < 0.8T_N$ слабо зависят от температурной зависимости спина $S_T(T) \cong S$

$$Z_j = \sum_m \exp(-\beta E_{jm}), \quad \Phi = -(N_1/\beta) \sum \ln Z_j. \quad (26)$$

Термодинамический потенциал $\phi(T, H)$ показан на рис. 2, a; энтропия (рис. 2, b) и теплоемкость (рис. 2, c) показывают аномалию (максимум $C_m(T)$) Шоттки, которая уменьшается в поле $H = 3T$.

Моменты ионов RE-подрешеток

$$J_j(T, H) = Z_j^{-1} \sum_{m>0} m \exp(\beta km^2) \times \text{sh}\{\beta[A - (-1)^j \mu_J H]\}, \quad (27)$$

намагниченность $M(T, H)$ и АФМ-вектор $L(T, H)$, рассчитанные для $J = 3, A = 3k_B, k = k_B, \mu_J H \leq 5k_B$ при $T = 1$ и 4 K , приведены на рис. 3. Кривые (27) безгистерезисные. Перегибы на кривой намагничивания $M(T = 1\text{ K}, H)$ тем круче, чем больше (k/A) . Они часто принимаются за метамагнитные кривые (авторами [1] тоже), что неверно. Для метамагнитного перехода первого рода характерен гистерезис [18]. Отметим также немонотонность теплоемкости $C_m(H)$ в окрестности $H \sim H_E = A/\mu_J$ (рис. 3, c).

5. Рассеяние зонных электронов на ФХС

При низких $T \leq 10\text{ K}$ электроны рассеиваются в основном на точечных дефектах. Правила Линде предполагают наличие кулоновских центров. Их главной характеристикой (обычно подгоночной) полагается валентность $Z \neq Z_0$ — валентности матрицы [19]. При конкретных расчетах возникает практически трудно разрешимая проблема экранирования заряда центра. Она равноценна проблеме химических связей неидеальной решетки. Рассмотрим обратную задачу — нарушение идеальности химических связей, т.е. нарушение трансляционной инвариантности. В модели ФХС проблема сводится к "нулевым" ФХС, которые уменьшают параметры устойчивости (9b)

$$\rho_{ij} \cong 1 - \sum N_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{jj} (1 + |P(\mathbf{k})|^2) = \rho_{j0}^2 [P] - \alpha_{3/2} (T/T_{p2})^{3/2} \quad (28)$$

за счет фактора неоднородности $P(\mathbf{k})$ (см. (14)). В данной схеме проблема сводится к хорошо разработанной задаче рассеяния на квазичастицах (здесь на ФХС).

В гамильтониане рассеяния учитываем снова только перескоки между RE(1)- и Ni(2)-ионами

$$\mathcal{H}^{\text{scaff}} = \sum \Lambda_{jj} d_{jr\sigma'} f_{jr'\sigma}^+ f_{jr\sigma} \bar{d}_{jr'\sigma} + \sum [\Lambda_{12} d_{1r\sigma'} f_{2R\sigma}^+ f_{1r\sigma} \bar{d}_{2R\sigma'} + \text{H.c.}] \quad (29)$$

Трехчастичные процессы в k -представлении

$$\mathcal{H}_3^{\text{scaff}} = \sum [\Lambda_{jj} d_{j0\sigma'} f_{jk\sigma}^+ f_{jk'\sigma} \bar{d}_{jk_0\sigma'} + \text{H.c.}] + \dots, \quad \mathbf{K}_0 = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (29a)$$

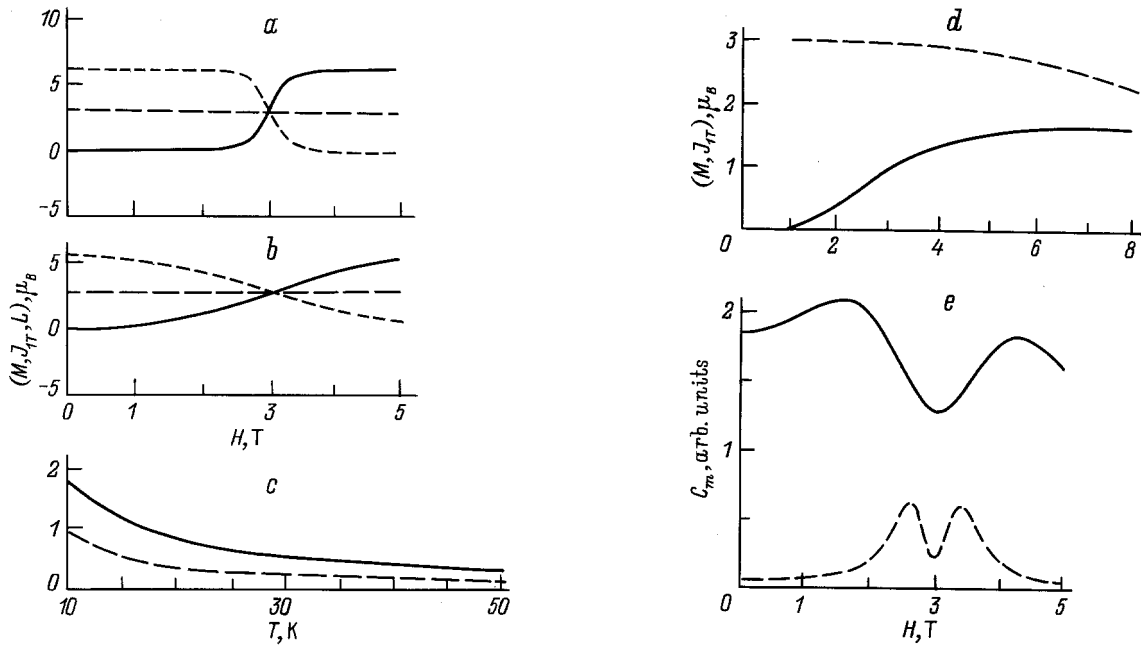


Рис. 3. Рассчитанные зависимости среднего редкоземельного углового момента $J_{1T}(T, H)$, параллельного магнитному полю \mathbf{H} (штриховая кривая), намагниченности M (сплошная кривая) и антиферромагнитного вектора L (пунктирная кривая) от магнитного поля H при $T = 1$ (a) и 4 К (b), от температуры T ниже (c) и выше (d) точки Нееля $T_N = 10$ К при $H = 2$ Т. e — зависимость магнитной теплоемкости $C_m(T, H)$ от магнитного поля H при $T = 3$ (сплошная кривая) и 1 К (штриховая кривая).

описывают рассеяние с возбуждением ФХС. Возбуждение пары ФХС описывается четырехчастичным гамильтонианом вида (29). Из (29а) получаем интегральные части уравнений движения (16а), например,

$$\text{Int}_1 = - \sum \left\{ \Lambda_{11} F_{66}^{111}(0, \mathbf{k}', \mathbf{K}_0) + \Lambda_{11}^*(-\mathbf{K}_0, \mathbf{k}', 0) + \Lambda_{12}^*[F_{\sigma\sigma'}^{221}(-\mathbf{K}_0, \mathbf{k}', 0) + F_{\sigma\sigma'}^{221}(0, \mathbf{k}', \mathbf{K}_0)] \right\}, \quad (30)$$

где функция Грина второго порядка

$$F_{\sigma\sigma'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \langle\langle d_{ik'\sigma'} f_{jp\sigma} \bar{d}_{lq\sigma'} | f_{1k\sigma}^+ \rangle\rangle \quad (31)$$

описываются системами четырех уравнений движения. Они имеют свободные члены, содержащие функции Грина первого порядка $F_{\mathbf{k}\sigma}^{ij}$ (16).

Достаточно громоздкое решение этих уравнений приводит к перенормировке зонных спектров (22). Важнейший вклад во время релаксации $\tau_{jk}(E)$ нижней зоны при $T \gtrsim T_N$

$$\tau_{jk}^{-1}(E) = \sum \hat{\Lambda} \otimes \hat{\Lambda} \otimes \hat{D} \delta(E - E_{jk}^- + \varepsilon_{\mathbf{K}_0}^-), \quad \varepsilon_{\mathbf{q}}^- = -\Gamma_{\mathbf{q}} \mathbf{q}^2, \quad (32)$$

учитывает сохранение энергии и импульса (\mathbf{K}_0 — вектор рассеяния) (29а)

$$\mathbf{k}^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{K}_0)^2 - (2\Gamma_{-m_{j-}})\mathbf{K}_0^2 = 0, \quad \mathbf{K}_0 = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \quad (33)$$

Поле H влияет на (32) через коэффициенты (23) увеличения эффективных масс $m_{j-}(J_{JT})$. Матрицы корреляторов

$$D_{ijpr} = \langle d_{i0} \bar{d}_{j\mathbf{K}_0} d_{p\mathbf{K}_0} \bar{d}_{r0} \rangle \cong \rho_{ii} \left(\frac{1}{N_j} \delta_{jp} - N_{\mathbf{K}_0}^{ip} \right) \quad (34)$$

и коэффициентов $\hat{\Lambda}$ (30) не должны сильно зависеть от m_j . При $T < T_N$ и $|A_{s-f} J| \sim t_0$ добавляются вклады, отличающиеся от (32), которые могут зависеть от J_{JT} . Суммарная величина затухания тогда сложным образом зависит от H .

6. Электросопротивление и магнетосопротивление АФМ-интерметаллидов

Используем формулу Друде для ЭС [19]

$$\rho = \left(\sum \rho_{j\sigma\pm}^{-1} \right)^{-1}, \quad \rho_q^{-1} = e^2 n_q \tau_q / m_q, \quad q = (j, \pm, \sigma), \quad (35)$$

где e — заряд электрона, n_q — число, τ_q — время релаксации (см. раздел 5), m_q — эффективная масса (см. раздел 3) электронной p -полосы.

1) Положительное МЭС RE-интерметаллида. В модели, использованной в разделе 3, значительные числа n_q электронов содержатся только в двух зонах: $E_{1\mathbf{k}\uparrow}^-$ и $E_{2\mathbf{k}\downarrow}^-$. Оценим n_q , используя выражения

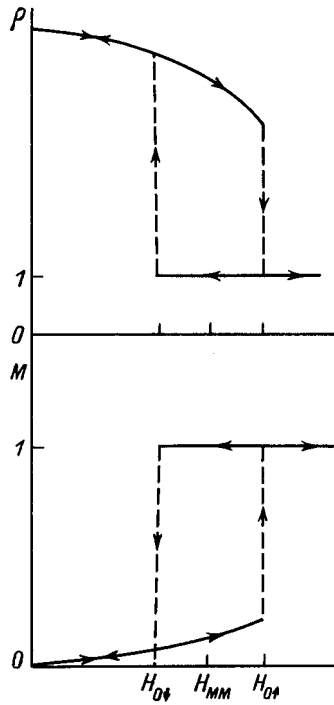


Рис. 4. Рассчитанные зависимости от магнитного поля H (в относительных единицах) намагниченности $M(H)$ и электросопротивления (ЭС) $\rho(H)$ в двухподрешеточном метамагнетике. Штриховыми линиями показан гистерезис метамагнитного перехода первого рода, его граничные поля $H_{0\uparrow}$ и $H_{0\downarrow}$, поле метамагнетизма H_{MM} .

эффективных энергий Ферми $\epsilon_{Fq}(\mathbf{H})$,

$$n_q \sim k_{Fq}^3, \quad (k_{Fq}^2/2m_q) = \epsilon_{F0} + \sigma A_{s-f}[J_{JT}(T, \mathbf{H}) - J_{JT}(T, 0)], \quad q = j, \sigma. \quad (36)$$

В предельном случае $|A_{s-f}J| \gg \epsilon_{F0}$ в полях $H \sim H_E$ электроны скапливаются в $(1, -, \uparrow)$ -зоне, и $n_{1\uparrow} \gg n_{2\downarrow}$. Величина ЭС растет в поле H

$$\rho^{-1}(T, H) \cong n_{el}\tau_1(T, H)/K_1(T, H)m_1(T, 0) \cong \rho^{-1}(T, 0)/K_1^p(T, H), \quad (37)$$

коэффициент увеличения массы (23b) K_1 и показатель $p \gtrsim 1$.

Знак МЭС определим в пределе $|A_{s-f}J/t_0| \gg 1$

$$\Delta R(T, H) = \frac{\rho(T, H)}{\rho(T, 0)} - 1 \cong [J_1(T, H)/J_1(T, 0)]^p - 1 > 0, \quad q < p < 2. \quad (37a)$$

Оценка (37a) дает гигантское положительное МЭС только при $0.8T_N > T > E$. При $T < T_E = A/k_B$ момент $J_1 = J$, и все эффекты выражаются через $J_2(T, \mathbf{H})$. При $T \gg T_N$ МЭС имеет величину $\Delta R(T, \mathbf{H}) \sim M^2(T, \mathbf{H})$.

2) Отрицательное МЭС в двухподрешеточном метамагнетике. При малых $H \ll H_{MM}$

в формуле (35) можно считать постоянными n_q . Изменяются массы $m_j(L)$ и $\tau_j \sim m_j^{1-p}$. Согласно [19], при рассеянии на квазичастицах (фононах, а также ФХС, см. раздел 5) $p = 2$. Намагничивание уменьшает вектор \mathbf{L} и ЭС (35). В окрестности метамагнитного перехода $H \cong H_{MM}(T)$ гистерезис $M(H)$ сопровождается гистерезисом ЭС $\rho(H)$ (рис. 4). Величина скачка ЭС на рис. 4 является отрицательным МЭС, которое определяется коэффициентом увеличения эффективной массы в АФМ-фазе Q_T^p (20). При $|A_{s-f}J/t_0| \gg 1$ выполняется условие $K(L = 1) \gg 1$ и отрицательное МЭС оказывается "гигантским" (при $H > H_{MM}$ падение ЭС в 10–100 раз) [2].

7. Классификация эффектов

Большое ЭС $\rho \sim 10^{-5} \Omega \cdot \text{см}$ плохих металлов связано с малым числом носителей заряда $n_{el} \leq 10^{21}$ и малыми энергиями Ферми $\epsilon_F \lesssim 1 \text{ eV}$. Поэтому в них обменное расщепление зонного спектра $|A_{s-f}J_{JT}| \gtrsim \epsilon_F$. Оно определяется средним моментом J_{JT} иона j -подрешетки и подрешеточной структурой. При квадратичном законе дисперсии зонных электронов возможно выделение типов обменного расщепления (j, σ)-подполос, что приводит к классификации МЭС по величине и знаку.

Линейное по J_T расщепление в ФМ-фазе на σ -подзоны приводит к МЭС порядка $|\Delta R| \ll 0.1$. В двухподрешеточной АФМ-фазе расщепление j -подзон является иррациональной функцией АФМ-вектора $\mathbf{L}(T, \mathbf{H})$, что дает $\Delta R < 0$. При большем числе АФМ-подрешеток зонный спектр зависит от нескольких \mathbf{L}_j , и знак МЭС определяется топологией АФМ-порядка. В частном случае пар подрешеток, образуемых ионами с разными \mathbf{J}_{JT} , возможно $\mathbf{L}_j \cong \mathbf{J}_{JT}$. Тогда знак МЭС определяется ходом $\mathbf{J}_{JT}(T, \mathbf{H})$. Эффективные массы $m_{j\sigma}$ также сильно зависят от \mathbf{J}_{JT} .

Увеличение $m_{j\sigma}(\mathbf{J}_{JT})$ при переходе в АФМ-фазу ($T < T_N$) приводит к возрастанию ЭС. Возможность уменьшения ЭС появляется в поле $H > H_{MM}$ при переходе в ФМ-фазу, т.е. появляется "гигантское" отрицательное МЭС. В сложных многоподрешеточных магнетиках зависимости $m_{j\sigma}(\mathbf{J}_{JT})$ в общем случае немонотонны. Топология некоторых моделей допускает монотонный рост \mathbf{J}_{JT} , $\mathbf{M}(T, \mathbf{H})$ и $m_{j\sigma}$ в поле \mathbf{H} , что увеличивает ЭС.

Развитая многоэлектронная теория химических связей приводит к следующим результатам.

1) Косвенное обменное взаимодействие A_{ij} между ионами i, j -подрешеток через ковалентные электроны больше такового через зонные электроны (например, РККИ) в плохих металлах. Его параметры A_{ij} выражаются через квазихимические параметры Γ_{ij} : $A_{ij} \sim \Gamma_{ij}$.

2) ФХС определяют стабильность решетки и влияют на спектры Ферми- и Бозе-квазичастиц.

3) Прямой расчет (j, σ)-зон электронов приводит к функциональным зависимостям их положения (дна) и массы $m_{k\sigma}$ от энергии s - f -обмена и локального момента J_{JT} .

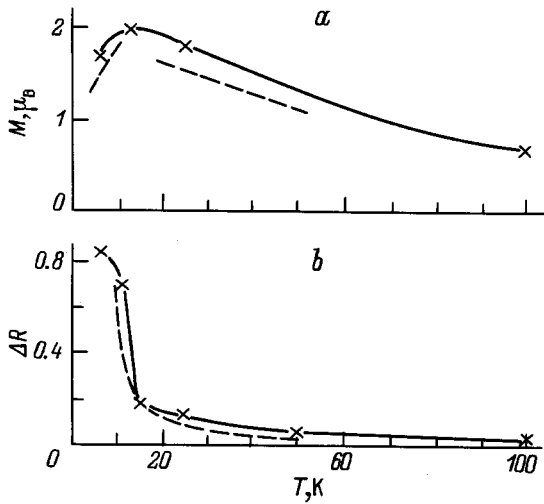


Рис. 5. Рассчитанные зависимости (штриховые линии) от температуры T намагниченности M (в магнетонах Бора на RE-ион) (а) и магнетосопротивления $\Delta R(T)$ (б) четырехподрешеточной АФМ-модели (рис. 1) RE–Ni-интерметаллида. Сплошными линиями приведены экспериментальные данные [1] для RE = Tb, на них крестиками обозначены экспериментальные точки.

4) Построена четырехподрешеточная АФМ-модель RE–Ni-интерметаллидов с низкими T_N и большими полями H_A одноионной магнитной анизотропии. Перегибы $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ в полях $H \sim H_E \cong A_{12}J/\mu_B$ при $T \lesssim T_A(\mu_{\text{max}}/k_B)H_A$ имитируют метамагнитные кривые $\mathbf{M}(\mathbf{H})$. При интерпретации экспериментальных данных следует различать метамагнетики, многоподрешеточные АФМ-модели и кластерные АФМ-структуры [16,17].

5) Рассеяние зонных электронов на ФХС определяет высокое ЭС в многоподрешеточных интерметаллидах. Неоднородность распределения ионов и большие плотности "нулевых" ФХС приводят к большим вкладам в затухание $\tau_{j\sigma}^{-1}$ зонных электронов.

6) Сильные зависимости масс $m_{j\sigma}(\mathbf{J}_{jT})$ и плотностей электронов (j, σ)-подзон от моментов \mathbf{J}_{jT} приводят к "гигантскому" положительному МЭС в данной модели RE–Ni-интерметаллида.

7) Гигантское отрицательное МЭС ($\Delta R(\mathbf{L}) < 0$) при метамагнитном переходе обусловлено большим коэффициентом $Q_L(\mathbf{L}) \gg 1$ увеличения масс $m_{j\sigma}$ в АФМ-фазе. Уменьшение $\mathbf{L}(\mathbf{H})$ при намагничивании уменьшает Q_L и ЭС. Сравнение с данными [2] для UNi(Ga, Ge, Al) позволяет найти $Q_L \sim 10$.

8) Сравнение рассчитанных кривых $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ и $\Delta R(T, \mathbf{H})$ (рис. 5) с данными [1] позволяет найти параметры теории $p = 2$ и $|A_{s-f}/t_0| = 0.6$ при $\mu = 0$.

Список литературы

- [1] С. Mazumdar, А.К. Nigam, R. Nagarajan, С. Godart, L.C. Gupta, B.D. Podalia, G. Chandra, R. Vijayaraghavan. *Appl. Phys. Lett.* **68**, 25, 3647 (1996).
- [2] H. Nacott, K. Prodeš, E. Brück. *J. Appl. Phys.* **75**, 10, Pt. 2B, 6522 (1994).
- [3] А.Б. Грановский, А.В. Ведяев, Б. Дисни, А.В. Калицов, М.Г. Чшиев. *ФТТ* **38**, 8, 2471 (1996).
- [4] А.А. Смирнов. Молекулярно-кинетическая теория металлов. Наука, М. (1966). 488 с.
- [5] Р. Бозорт. Ферромагнетизм. М. (1956). 784 с.
- [6] L. Piraux. *J. Magn. Magn. Mater.* **128**, 3, 313 (1993).
- [7] V. Sechovsky, L. Havela, K. Prokeš. *J. Appl. Phys.* **76**, 10, 6913 (1994).
- [8] H. Fujii, K. Kawanaka, N. Nagasawa. *J. Magn. Magn. Mater.* **90–91**, 1, 507 (1990).
- [9] К. Тейлор, М. Дарби. Физика редкоземельных соединений. Мир, М. (1974). 374 с.
- [10] M.P. Annaorazov, S.A. Nikitin, A.L. Tyurin. *J. Appl. Phys.* **79**, 3, 1689 (1996).
- [11] H. Morita, K. Koike, T. Kaneko. *JMMM* **140–144**, Pt. 1, 77 (1995).
- [12] N.V. Baranov, Yu.A. Khrulev. *J. Magn. Magn. Mater.* **140–144**, Pt. III, 1543 (1995).
- [13] V. Madurga, R.J. Ortega, V.N. Korenivski. *J. Magn. Magn. Mater.* **140–144**, Pt. I, 465 (1995).
- [14] J. Nishino, S. Inone, S. Asano. *Phys. Rev.* **B48**, 18, 13607 (1993).
- [15] А.И. Мицек. *ФММ* **76**, 6, 3 (1993).
- [16] А.И. Мицек. *ФТТ* **35**, 3, 577 (1993).
- [17] А.И. Мицек, В.Н. Пушкарь, В.А. Мицек. *Металлофизика* **18**, 5, 37 (1996).
- [18] А.И. Мицек, В.Н. Пушкарь. *ФТТ* **37**, 10, 2865 (1995).
- [19] Ф.Дж. Блатт. Теория подвижности электронов в твердых телах. М.–Л. (1963). 224 с.