

Упорядочение в узкозонном магнитном металле с обменным взаимодействием

Е.С. Орел

*Харьковская национальная академия городского хозяйства
ул. Революции, 12, г. Харьков, 61002, Украина
E-mail: jeamesorel@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 10 мая 2012 г.

Рассчитана температура магнитного упорядочения Θ_C систем с двойным обменом в модели взаимодействующих спиновых волн. Проведен сравнительный анализ с расчетами в модели молекулярного поля и спин-волновой модели. Получен максимум температуры магнитного перехода Θ_C при электронной концентрации $x = 0,35$, что лучше согласуется с экспериментом ($x = 0,33$), чем расчеты Θ_C в модели молекулярного поля и спин-волновой модели.

Розраховано температуру магнітного впорядкування Θ_C систем з подвійним обміном в моделі взаємодіючих спінових хвиль. Проведено порівняльний аналіз з розрахунками в моделі молекулярного поля і спин-хвильової моделі. Отримано максимум температури магнітного переходу Θ_C при електронній концентрації $x = 0,35$, що краще відповідає експерименту ($x = 0,33$), ніж розрахунки Θ_C в моделі молекулярного поля та спин-хвильової моделі.

PACS: 75.10.Lp Зонные и коллективизированные модели;
75.30.-m Специфические свойства магнитоупорядоченных материалов;
75.80.+q Магнитомеханические и магнитоэлектрические эффекты, магнитострикция.

Ключевые слова: магнон, относительная намагниченность, модель динамического молекулярного поля, функция Грина.

1. Введение

Системы с двойным обменом, значительную часть которых составляют манганиты, привлекают большое внимание благодаря проявлению в них эффекта колоссального магнитосопротивления [1]. Теория магнитного упорядочения манганитов интенсивно развивается. Отметим, что результатом численного расчета температуры магнитного упорядочения Θ_C систем с двойным обменом, выполненным в модели динамического молекулярного поля [1], в настоящей работе воспользоваться нельзя, поскольку расчет в [1] проведен для случая $3 \leq J/W < \infty$, тогда как в данной работе $J/W \approx 0,1$ (J — хундовский обменный интеграл, W — ширина электронной зоны соединения).

В настоящей работе представлены результаты расчета температуры магнитного упорядочения Θ_C таких систем в модели взаимодействующих спиновых волн в высокотемпературном пределе функции распределения магнонов [2–4], справедливые при менее жестких требованиях к параметрам соединения. Расчет магнонного

спектра методом двухвременных запаздывающих функций Грина [5] позволил определить зависимость Θ_C от параметров системы.

2. Температура перехода

Следуя [3,6], рассмотрим заполнение магнонных состояний в области температур $\Theta \sim \Theta_C$. Относительная намагниченность

$$\sigma(\Theta) = 1 - \frac{n(\Theta)}{S} \quad (1)$$

определяется числом всех спиновых отклонений в расчете на узел кристаллической решетки (принимая, для простоты, что среднее значение спина равно S)

$$n(\Theta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}, \quad (2)$$

где $n_{\mathbf{q}}$ — магнонная функция распределения

$$n_{\mathbf{q}} = \left[\exp(\varepsilon_{\mathbf{q}} / \Theta) - 1 \right]^{-1}, \quad (3)$$

а $\varepsilon_{\mathbf{q}}$ — энергия магнонов.

При $\Theta > \varepsilon_{\mathbf{q}}$ число магнонов с квазиимпульсом \mathbf{q} может быть приближенно представлено следующим выражением:

$$n_{\mathbf{q}} = \frac{\Theta}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \quad (4)$$

Если соотношение (4) выполняется для большинства магнонов, то относительную намагниченность, используя (1)–(3), можно приближенно представить в виде

$$\sigma(\Theta) = 1 - \frac{2\Theta}{WS} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 - \gamma_{\mathbf{q}}} \quad (5)$$

Величина суммы в (5)

$$C = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 - \gamma_{\mathbf{q}}} \quad (6)$$

зависит от типа магнитной решетки и равна 1,5164, 1,393 и 1,345 для ПК, ОЦК и ГЦК структур соответственно [8,9].

В области высоких температур, когда число спиновых отклонений велико и межмагнонное взаимодействие становится существенным, соответствующие эффекты нелинейности в магнонном спектре можно учесть в первом приближении следующей перенормировкой ширины магнонной зоны [3,6,7,10]:

$$\tilde{W} = W \left(1 - \frac{1}{SN} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) n_{\mathbf{q}} \right) \approx W - \frac{2\Theta}{S} \quad (7)$$

В точке магнитного упорядочения относительная намагниченность обращается в нуль, и из (5), (6) с учетом (7) получаем

$$\Theta_C = \frac{WS}{2(C+1)} \quad (8)$$

Рассмотрим гейзенберговский магнитный металл ($W = 4I_0zS$) с ПК решеткой ($z = 6$ — координационное число, I_0 — обменный интеграл в равновесном положении узлов решетки) и спином $S = 7/2$ и сравним значения температур перехода, полученные различными методами. Наименьшее значение, которое примем за основу, дает спин-волновая модель в приближении Боголюбова–Тябликова [8,11,12]: $\Theta_C = W(S+1)/6C$.

Несколько большее значение дает формула Рашбрука–Вуда [6,10], полученная методом высокотемпературных разложений магнитной восприимчивости $\Theta_C = \frac{5}{96} I_0(z-1)[11S(S+1)-1]$. Модель молекулярного поля приводит к значению, превышающему «спин-волновое» примерно в 1,5 раза: $\Theta_C = W(S+1)/6$.

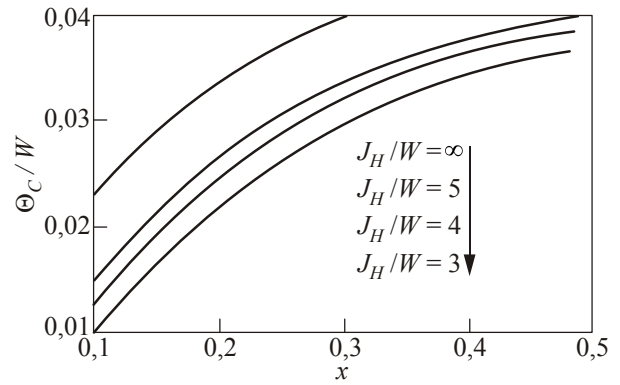


Рис. 1. Зависимость Θ_C/W от электронной концентрации x [1].

На рис. 1 приведены результаты расчета температуры Кюри Θ_C в модели молекулярного поля [1].

Видно, что температура Кюри достигает максимального значения при электронной концентрации $x = 0,5$, тогда как эксперимент дает значение $x = 0,33$ [1].

Точность определения температуры Кюри с помощью выражения (8) примерно такая же, как с помощью модели молекулярного поля. Подставляя в (8) ширину зоны акустических магнонов [5], рассчитанной для ПК решетки ($\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{3} [\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)]$) в приближении поверхности Ферми поверхностью куба со стороной $k_F = \pi x^{1/3}/a$

$$W_{ac} = \frac{T z x^{2/3} \sin(k_F a)}{\pi (\langle S^z \rangle + \langle s^z \rangle)},$$

где $\langle S^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \langle 0 | S_{\lambda}^z | 0 \rangle$, $\langle s^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow})$ — средние значения локальных и квазилокальных спинов, T — интеграл перескоков, получаем

$$\Theta_C = \frac{zTSx^{2/3} \sin(k_F a)}{2\pi(C+1)(\langle S^z \rangle + \langle s^z \rangle)} \quad (9)$$

Если учесть результат работы [3], из которого следует, что магнонная жесткость в системе с двойным обменом [3] вблизи точки Кюри выше, чем в гейзенберговском магнетике, то можно ожидать, что значение Θ_C будет выше, чем предсказывает модель молекулярного поля. В таком случае различие между величиной Θ_C (9), в которой это увеличение магнонной жесткости не учитывается, и истинным значением Θ_C должно сократиться по сравнению с рассчитанным по формуле (8).

3. Сравнение с экспериментом

Полагая в (9) $W = 1,5$ эВ, спин магнитных ионов $S = 1,5$ и величину структурной константы $C = 1,345$ [1] (величины, характерные для соединения $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$), получаем зависимость Θ_C от электронной концентрации x , представленную на рис. 2. Формула (9) качест-

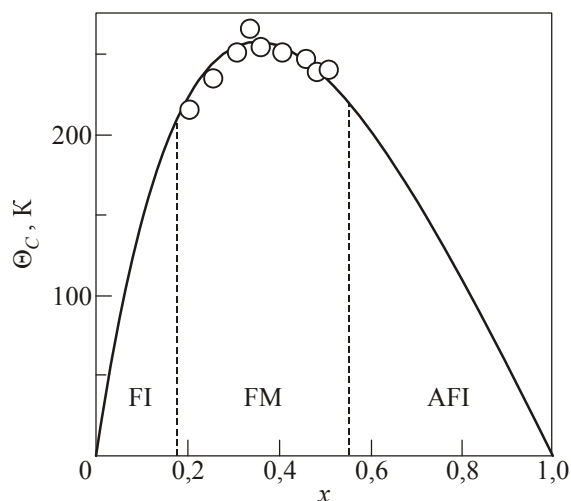


Рис. 2. Зависимость температуры Кюри от концентрации легирующего элемента в соединении $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$: расчет (1) (—), эксперимент [1] (○). FI — ферромагнитный изолятор, FM — ферромагнитный металл, AFI — антиферромагнитный изолятор.

венно правильно описывает вид функции $\Theta_C(x)$, в частности обеспечивает максимум Θ_C при $x = 0,35$.

4. Выводы

Проведенный анализ показывает, что точность определения температуры Кюри с помощью выражения (9) вполне сопоставима с точностью определения величины Θ_C гейзенберговского магнитного металла с помощью модели молекулярного поля. Следует отметить также, что формула (9) дает максимум Θ_C при $x = 0,35$, что гораздо лучше соответствует эксперименту ($x = 0,33$) [1], чем величина, получаемая численным методом в модели динамического молекулярного поля [2], которая дает максимум Θ_C при $x = 0,5$.

Автор признателен А.А. Звягину за полезные обсуждения и существенные критические замечания, Н.Ф. Харченко за интерес и поддержку работы.

Автор рад приурочить эту работу к 80-летию юбилею В.В. Еременко, доброжелательность и заботливое внимание которого автор ощущал за все время учебы и работы во ФТИНТе.

1. N. Furukawa, in: *Physics of Manganites*, T.A. Kaplan, and S.D. Mahanti (eds.), Kluwer Academic, New York, 1 (1999).
2. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, *УФН* **171**, 121 (2001).
3. Д. Маттис, *Теория магнетизма*, Мир, Москва (1967).
4. Э.Л. Нагаев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
5. А.Б. Безносков, Е.С. Орел, *ФНТ* **30**, 1053 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 790 (2004)].
6. J.L. Erskine and E.A. Stern, *Phys. Rev.* **B8**, 1235 (1973).
7. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
8. Ю.П. Ирхин, В.Ю. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях*, УрО РАН, Екатеринбург (2004).
9. E. Dagotto, T. Hotta, and A. Moreo, *Phys. Rep.* **344**, 1 (2001).
10. Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, Москва (1985).
11. V.Yu. Irkhin and A.V. Zarubin, *Solid State Phenom.* **168–169**, 469 (2011).
12. А.С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976).
13. F.J. Ohkawa, *Phys. Rev.* **B65**, 174424 (2002).
14. J.M.D. Coey, M. Viret, and S. von Molnar, *Adv. Phys.* **48**, 167 (1999).

Ordering in a narrow-band magnetic metal with exchange interaction

E.S. Orel

The temperature of magnetic ordering Θ_C of systems with a double exchange is calculated by using the model of interacting spin waves. A comparative analysis is performed with the calculations by the model of molecular field and the spin-wave one. A maximum of the magnetic transition temperature Θ_C is obtained for electronic concentration $x = 0.35$, that agrees with the experiment ($x = 0.33$) better than the calculations of Θ_C in the model of molecular field and the spin-wave one.

PACS: 75.10.Lp Band and itinerant models;
75.30.-m Intrinsic properties of magnetically ordered materials;
75.80.+q Magnetomechanical effects, magnetostriction.

Keywords: magnon, relative magnetized, model of the dynamic molecular field, Green function.