

PACS numbers: 71.15.Ap, 71.20.Be, 71.27.+a, 71.28.+d, 72.10.Bg, 75.30.Mb, 75.40.Cx

**Електронна структура и температурная зависимость
размера областей однородного магнитного ближнего порядка
в закаленном неупорядоченном сплаве ОЦК-Fe_{0,5}Co_{0,5}**

С. П. Репецкий*, В. А. Татаренко^{*,**}, И. Н. Мельник*, Е. Г. Ленъ**,
И. Г. Вышиваная*, Т. С. Ленъ^{***}

**Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко,
физический факультет, кафедра физики функциональных материалов,
просп. Акад. Глушкова, 2,
03022 Київ-22, Україна*

***Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

****Национальный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт»,
факультет биотехнологии и биотехники,
просп. Победы, 37,
03056 Киев-56, Украина*

Исследована температурная зависимость характерных размеров областей (типа «магнитных доменов») с однородным магнитным ближним порядком в сплаве Fe_{0,5}Co_{0,5}. Выявлен микроскопический механизм магнитного упорядочения сплава с сильными электронными корреляциями. В расчетах использована теория энергетического спектра и термодинамического потенциала для магнитных бинарных сплавов замещения переходных металлов. Теория основана на кластерном разложении для функций Грина и термодинамического потенциала неупорядоченного кристалла сплава.

Досліджено температурну залежність характерних розмірів областей (типу «магнетних домен») з однорідним магнетним близьким порядком в стопі Fe_{0,5}Co_{0,5}. Виявлено мікроскопічний механізм магнетного упорядкування стопу з сильними електронними кореляціями. У розрахунках використано теорію енергетичного спектру і термодинамічного потенціалу для магнетних бінарних стопів заміщення перехідних металів. Теорія базується на кластерній розвиненні для Грінових функцій та термодинамічного потенціалу неупорядкованого кристалу стопу.

Temperature dependence of the characteristic sizes of regions of ‘magnetic-

domain' type with the homogeneous magnetic short-range order in an alloy of $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ is considered. The microscopic mechanism of magnetic ordering in an alloy with strong electron correlations is revealed. The theory of energy spectrum and thermodynamical potential for magnetic binary substitutional alloys, which consist of transition metals, is used for calculations. The theory is based on a cluster expansion for the Green functions and thermodynamical potential of disordered crystal of an alloy.

Ключевые слова: электронная структура, энергетический спектр, магнитный порядок, магнитная корреляционная длина, функции Грина.

(Получено 10 декабря 2007 г.; окончат. вариант — 28 августа 2008 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Fe–Co широко используются как технологические магнитно-мягкие материалы с относительно большими значениями магнитного насыщения и температуры Кюри. Долгое время считалось, что указанные свойства связаны с дальним атомным упорядочением по типу $B2$ во всем объеме сплавов [1, 2]. Однако в экспериментальной работе [3] впервые показано, что такое упорядочение происходит лишь в 10% объема сплава $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$, а структурное состояние сплава Fe–Co слабо влияет на его магнитные характеристики.

Существенное влияние на свойства систем с узкими энергетическими зонами, в частности сплавов на основе переходных металлов, оказывают сильные электронные корреляции. Развитию электронной теории систем с сильными электронными корреляциями, к которым относятся сплавы Fe–Co, посвящено множество работ (см., например, [4–6]). В работе [6] развита теория энергетического спектра и фазовых превращений сплавов с узкими энергетическими зонами. Электронные состояния системы описываются в рамках многозонной модели сильной связи. Учтены процессы рассеяния электронов на потенциалах ионных остовов, флуктуациях спиновой и электронной плотностей, а также на колебаниях кристаллической решетки. Применяя указанную теорию, авторы работы [7] объяснили относительно высокие значения намагниченности насыщения сплавов Fe–Co положением уровня Ферми в области квазищели в энергетическом спектре электронов, возникающей благодаря как атомному упорядочению, так и сильному кулоновскому взаимодействию между электронами. В работе [8] исследованы зависимость пространственных размеров магнитных доменов сплава $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ от величины внешнего магнитного поля, а также взаимное влияние атомного и магнитного порядков. Указанные исследования проведены для $T = 0$ К. В настоящей работе, на основе развитого в [6, 9] подхода, исследована температурная зависимость магнитного упорядочения сплава $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$.

2. ФУНКЦИИ ГРИНА И ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Гамильтониан системы электронов и фононов неупорядоченного кристалла определяется выражением

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

где гамильтониан нулевого приближения H_0 и гамильтониан возмущения H_{int} имеют вид

$$H_0 = \Phi_0 + H_{f_0} + H_{e_0}, \quad H_{\text{int}} = H_{ei} + H_{ef} + H_{ee} + H_{fi} + H_{ff}. \quad (2)$$

Здесь H_0 состоит из энергии электростатического взаимодействия ионов в положении равновесия Φ_0 и гамильтонианов подсистем не взаимодействующих фононов H_{f_0} и электронов H_{e_0} ; H_{int} включает гамильтонианы электрон-ионного H_{ei} , электрон-фононного H_{ef} , парного электрон-электронного H_{ee} , фонон-ионного H_{fi} и фонон-фононного H_{ff} взаимодействий. Полные выражения для указанных гамильтонианов в представлении Ванье приведены в работе [10].

Одночастичные температурные функции Грина подсистемы электронов можно представить в виде [11]

$$G_{ni\gamma, n'i'\gamma'}^{aa^+}(\tau, \tau') = -\langle T_{\tau} a_{ni\gamma}(\tau) a_{n'i'\gamma'}^+(\tau') \sigma(1/\Theta) \rangle_0 / \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0, \quad (3)$$

функции Грина «смещение–смещение» подсистемы фононов —

$$G_{ni\alpha, n'i'\alpha'}^{uu}(\tau, \tau') = -\left\langle T_{\tau} u_{\alpha} \left(\begin{matrix} n \\ i \end{matrix} \middle| \tau \right) u_{\alpha'} \left(\begin{matrix} n' \\ i' \end{matrix} \middle| \tau' \right) \sigma(1/\Theta) \right\rangle_0 / \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0, \quad (4)$$

а функции Грина «импульс–импульс» подсистемы фононов —

$$G_{ni\alpha, n'i'\alpha'}^{PP}(\tau, \tau') = -\left\langle T_{\tau} P_{\alpha} \left(\begin{matrix} n \\ i \end{matrix} \middle| \tau \right) P_{\alpha'} \left(\begin{matrix} n' \\ i' \end{matrix} \middle| \tau' \right) \sigma(1/\Theta) \right\rangle_0 / \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0. \quad (5)$$

В выражениях (3)–(5) $\Theta = k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура; τ — «мнимое» время, $a_{ni\gamma}^+$, $a_{ni\gamma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии, описываемом функцией Ванье $\varphi_{ni\gamma}(\xi) = \langle \xi | ni\gamma \rangle$, $\xi = (\mathbf{r}, \sigma)$; индекс состояния γ определяется номером энергетической зоны и проекцией спина σ на ось z ; n — номер некой примитивной элементарной ячейки; i — номер одной из узельных подрешеток в кристалле; $u_{\alpha} \left(\begin{matrix} n \\ i \end{matrix} \middle| \tau \right)$ — оператор α -про-

екции смещения атома в узле (ni) ; $P_\alpha \left(\begin{matrix} n \\ i \end{matrix} \middle| \tau \right)$ — оператор α -проекции импульса атома на декартовы оси координат; скобки $\langle \dots \rangle_0$ обозначают операцию усреднения величин, заданных для конкретного расположения атомов разного сорта (A, B) , по состояниям системы невзаимодействующих электронов и фононов в чистом кристалле.

В формулах (3)–(5) введен оператор

$$\sigma(\tau) = e^{H_0\tau} e^{-H\tau}, \quad (6)$$

где $H = H_0 + H_{\text{int}}$; $H_0 = H_0 - \mu_e N_e$, μ_e , N_e — соответственно химический потенциал и оператор числа электронов.

Оператор $\sigma(\tau)$ (6) удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \sigma(\tau)}{\partial \tau} = -H_{\text{int}}(\tau) \sigma(\tau), \quad (7)$$

где $H_{\text{int}}(\tau) = e^{H_0\tau} H_{\text{int}} e^{-H_0\tau}$.

Решение уравнения (7) при условии $\sigma(0) = 1$, следующем из определения (6), имеет вид

$$\sigma(\tau) = T_\tau \exp \left[-\int_0^\tau H_{\text{int}}(\tau') d\tau' \right]. \quad (8)$$

Для вычисления температурных функций Грина неупорядоченного кристалла можно построить диаграммную технику, аналогичную диаграммной технике для однородной системы [11]. Разлагая экспоненту в выражении (8) в ряд по степеням $H_{\text{int}}(\tau)$, подставляя результат в (3)–(5) и используя теорему Вика [11, 12], получим замкнутую систему уравнений для функций Грина. Выполняя в указанной системе преобразования Фурье и используя известные соотношения между спектральными представлениями температурной и временной функций Грина [11], путем аналитического продолжения на действительную ось получим систему уравнений для запаздывающих функций Грина [6]:

$$\begin{aligned} G^{aa^+}(\varepsilon) &= G_0^{aa^+}(\varepsilon) + G_0^{aa^+}(\varepsilon) (w + \Sigma_{ef}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon)) G^{aa^+}(\varepsilon), \\ G^{uu}(\varepsilon) &= G_0^{uu}(\varepsilon) + G_0^{uu}(\varepsilon) (\Delta\Phi + \Sigma_{fe}(\varepsilon) + \Sigma_{ff}(\varepsilon)) G^{uu}(\varepsilon) + G_0^{uu}(\varepsilon) \Delta M^{-1} G^{PP}(\varepsilon), \\ G^{PP}(\varepsilon) &= G_0^{PP}(\varepsilon) + G_0^{PP}(\varepsilon) \Delta M^{-1} G^{PP}(\varepsilon) + G_0^{PP}(\varepsilon) (\Delta\Phi + \Sigma_{fe}(\varepsilon) + \Sigma_{ff}(\varepsilon)) G^{uu}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\varepsilon = \hbar\omega$, \hbar — постоянная Планка; ΔM^{-1} — тензор обратной мас-

сы; $\Delta\Phi$ — тензор силовых постоянных; w — случайная добавка к матричному элементу одноэлектронного гамильтониана чистого кристалла, связанная с наличием примеси. Явные выражения для массовых операторов функций Грина $\Sigma_{ee}, \Sigma_{ff}, \Sigma_{ef}$ [6], описывающие многочастичные взаимодействия в системе, можно получить, воспользовавшись диаграммной техникой [11].

Функции Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$, $G_0^{uu}(\varepsilon)$, $G_0^{PP}(\varepsilon)$ описываются выражениями

$$G_0^{aa^+}(\varepsilon) = [\varepsilon - H_0^{(1)}]^{-1}, \quad H_0^{(1)} = \|h_{ni',n'i'}^0\|, \quad (10)$$

$$G_{0nia,n'i'\alpha'}^{uu}(\varepsilon) = \frac{1}{NM_A} \sum_{j,\mathbf{k}} \frac{e_\alpha \begin{pmatrix} i & \mathbf{k} \\ j & \end{pmatrix} e_{\alpha'}^* \begin{pmatrix} i' & \mathbf{k} \\ j & \end{pmatrix}}{\varepsilon^2 / \hbar^2 - \omega_j^2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \bar{\rho}_{i'})}, \quad (11)$$

$$G_{0nia,n'i'\alpha'}^{PP}(\varepsilon) = \frac{M_A}{N} \sum_{j,\mathbf{k}} \frac{\omega_j^2(\mathbf{k}) e_\alpha \begin{pmatrix} i & \mathbf{k} \\ j & \end{pmatrix} e_{\alpha'}^* \begin{pmatrix} i' & \mathbf{k} \\ j & \end{pmatrix}}{\varepsilon^2 / \hbar^2 - \omega_j^2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \bar{\rho}_{i'})}, \quad (12)$$

где N — число примитивных ячеек кристалла; $j = 1, 2, \dots, 3\nu$, ν — число подрешеток; \mathbf{k} изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна; \mathbf{r}_n — радиус-вектор некой примитивной ячейки кристалла, $\bar{\rho}_i$ — радиус-вектор i -го узла в такой ячейке. В выражениях (11), (12)

$e_\alpha \begin{pmatrix} i & \mathbf{k} \\ j & \end{pmatrix}$, $\omega_j^2(\mathbf{k})$ — собственные векторы и собственные значения динамической матрицы; M_A — масса атома сорта A .

На основании выражения (12) для бесконечно большого кристалла $G_0^{PP}(\varepsilon) = M_A^2 \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \right) G_0^{uu}(\varepsilon)$, а решение системы (9) принимает вид:

$$G^{aa^+}(\varepsilon) = \left[[G_0^{aa^+}(\varepsilon)]^{-1} - (w + \Sigma_{ef}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon)) \right]^{-1}, \quad (13)$$

$$G^{uu}(\varepsilon) = \left[[G_0^{uu}(\varepsilon)]^{-1} - \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Delta\Phi + \Sigma_{fe}(\varepsilon) + \Sigma_{ff}(\varepsilon) \right) \right]^{-1}, \quad (14)$$

$$\Delta M^{-1} G^{PP}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M G^{uu}(\varepsilon). \quad (15)$$

При получении выражений (14), (15) квадратичными по $\Delta M^{-1} G_0^{PP}(\varepsilon)$ величинами пренебрегали по сравнению с единицей.

Функции Грина (13), (14) определены при заданном расположе-

нии атомов разного сорта в узлах кристаллической решетки. Для нахождения функций Грина, через которые выражаются плотности состояний подсистем электронов и фононов, необходимо усреднить выражения (13), (14) по расположениям атомов в узлах решетки. Таким образом, выражение для плотности электронных состояний на один атом имеет вид

$$g_e(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi v N} \text{Im Sp} \langle G^{aa^+}(\varepsilon) \rangle, \quad (16)$$

а для плотности состояний подсистемы фононов

$$g_f(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi v N} 2 \frac{\varepsilon}{\hbar^2} M_A \text{Im Sp} \langle G^{uu}(\varepsilon) \rangle. \quad (17)$$

В формулах (16), (17) скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по различным расположениям атомов.

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Определим термодинамический потенциал системы выражением

$$\Omega = -\Theta \ln \text{Sp}(e^{-H/\Theta}). \quad (18)$$

Воспользовавшись введенным выше оператором σ (6), перепишем выражение (18) в виде

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega', \quad \Omega' = -\Theta \ln \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0. \quad (19)$$

В отсутствие взаимодействия в системе термодинамический потенциал описывается слагаемым Ω_0 в формуле (19), которое можно расписать как

$$\Omega_0 = \Omega_c + \Omega_{0e} + \Omega_{0f}, \quad (20)$$

где термодинамический потенциал электронной подсистемы дается выражением:

$$\Omega_{0e} = -vN\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{\frac{\mu_e - \varepsilon}{\Theta}} \right) g_{0e}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (21)$$

а термодинамический потенциал подсистемы фононов имеет вид:

$$\Omega_{0f} = vN\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 - e^{\frac{\varepsilon}{\Theta}} \right) g_{0f}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (22)$$

В выражениях (21), (22) $g_{0e}(\varepsilon)$, $g_{0f}(\varepsilon)$ определяются формулами

(16), (17), в которых вместо $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$ нужно использовать функции Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$, $G_0^{uu}(\varepsilon)$.

Конфигурационная составляющая термодинамического потенциала Ω_c в формуле (20), зависящая от распределения атомов разного сорта по узлам кристаллической решетки, равна

$$\Omega_c = \langle \Phi_0 \rangle - \Theta S_c, \quad (23)$$

где $S_c = -\langle \ln P_c \rangle$ — конфигурационная энтропия; $P_c(\{c_{ni}^\lambda\})$ — функция распределения атомов по узлам решетки; c_{ni}^λ — случайные числа, принимающие значения 1 или 0 в зависимости от того, находится атом сорта λ в узле (ni) или нет.

Выражения для вклада в термодинамический потенциал Ω' , обусловленного процессами рассеяния электронов и фононов, получено в работе [6]:

$$\begin{aligned} \Omega' = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon, \varepsilon_F) \langle \text{Sp} (w(\lambda) + \Sigma_{ef}(\varepsilon, \lambda) + \Sigma_{ee}(\varepsilon, \lambda)) G^{aa^+}(\varepsilon, \lambda) \rangle + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \text{cth} \left(\frac{\varepsilon}{2\Theta} \right) \langle \text{Sp} (\Delta M^{-1}(\lambda) G^{PP}(\varepsilon, \lambda) + (\Delta\Phi(\lambda) + \Sigma_{ff}(\varepsilon, \lambda)) G^{uu}(\varepsilon, \lambda)) \rangle \right], \end{aligned} \quad (24)$$

где $f(\varepsilon, \varepsilon_F)$ — функция Ферми, ε_F — энергия на уровне Ферми.

Свободная энергия F как функция объема системы V , температуры T , числа электронов N_e и параметров межатомных корреляций ($\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a, \eta^a$), связана с термодинамическим потенциалом Ω соотношением

$$F = \Omega + \mu_e \langle N_e \rangle. \quad (25)$$

Конфигурационная часть энтропии сплава S_c в выражении (23) связана с вероятностями распределения атомов по узлам решетки $P_{n_1 i_1 \dots n_v i_v}^{\lambda_1 \dots \lambda_v}$ соотношением [13, 14]

$$S_c = - \left[\sum_{\substack{\lambda_1 \\ (n_1 i_1)}} P_{n_1 i_1}^{\lambda_1} \ln P_{n_1 i_1}^{\lambda_1} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ (n_1 i_1) \neq (n_2 i_2)}} P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\lambda_1 \lambda_2} \ln P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\lambda_1 \lambda_2} + \dots \right], \quad (26)$$

где $P_{ni}^\lambda = \langle c_{ni}^\lambda \rangle$, $P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\lambda_1 \lambda_2} = \langle c_{n_1 i_1}^{\lambda_1} c_{n_2 i_2}^{\lambda_2} \rangle$, а $\langle c_{n_1 i_1}^{\lambda_1} c_{n_2 i_2}^{\lambda_2} \rangle = c_{i_1}^{\lambda_1} c_{i_2}^{\lambda_2} + \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{a \lambda_1 \lambda_2}$ — вероятности замещения узлов ($n_1 i_1$) и ($n_2 i_2$) атомами сорта λ_1 и λ_2 ; $\langle c_{ni}^\lambda \rangle = c_i^\lambda$ — вероятности замещения узла i -ой подрешетки атомами λ , равные в случае кристаллов кубической симметрии для бинар-

ного сплава $c_i^A = x_i = c^A - \frac{v_2}{v} \eta^a$, $c_i^B = y_i = 1 - x_i$ — для v_1 подрешеток I-го типа и $x_i = c^A + \frac{v_1}{v} \eta^a$ — для v_2 подрешеток II-го типа; $v = v_1 + v_2$; η^a — параметр дальнего атомного порядка; c^A , $c^B = 1 - c^A$ — концентрации компонентов A, B кристалла соответственно; $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a = \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{AA} = \langle (c_{n_1 i_1}^A - c_{i_1}^A)(c_{n_2 i_2}^A - c_{i_2}^A) \rangle$ — параметры парных межатомных корреляций.

Равновесные значения параметров межатомных корреляций ($\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a, \eta^a$) определяются из условия минимума свободной энергии сплава во всей области их определения:

$$\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \eta^a} = 0. \quad (27)$$

В магнитных сплавах, наряду с «химическим» разупорядочением атомов, необходимо учитывать флуктуации зарядовой и спиновой плотностей в узлах кристаллической решетки. Поскольку электроны обладают как зарядом, так и спином, то кулоновское отталкивание между ними обуславливает сильную корреляцию в их движении в соответствии с принципом Паули. Это приводит, например, к пространственному перераспределению (статическим флуктуациям) плотности электронов с различными спинами и, как следствие, к появлению локализованных в узлах кристаллической решетки магнитных моментов. Таким образом, для магнитных сплавов необходимо дополнительно учесть, что в узле $(n_1 i_1)$ находится атом сорта λ_1 с локализованным магнитным моментом $m_{\lambda_1 i_1}$ (с вероятностью $P_{n_1 i_1}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1}}$). Локализованный магнитный момент $m_{\lambda_1 i_1}$ определяется разностью условных парциальных плотностей состояний с различными проекциями спина на данном узле:

$$m_{\lambda i} = \sum_{\gamma} m_{\lambda i \gamma}, \quad m_{\lambda i \gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \varepsilon_F) (g_{i n \gamma \sigma}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon) - g_{i n \gamma, -\sigma}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon)) d\varepsilon, \quad (28)$$

где

$$g_{i 0 \gamma \sigma}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \mathcal{G}_{i 0, i 0, \sigma}^{\lambda \gamma} + \mathcal{G}_{i 0, i 0, \sigma}^{\lambda \gamma} t_{i 0 \sigma}^{\lambda m_{\lambda i}, \gamma \gamma'} \mathcal{G}_{i 0, i 0, \sigma}^{\lambda \gamma} + \sum_{\substack{(j l) \neq (i 0) \\ \lambda', m_{\lambda j}}} P_{j l i 0}^{\lambda' m_{\lambda j} / \lambda m_{\lambda i}} \times \right. \\ \left. \times \left[\mathcal{G}_{i 0, i 0, \sigma}^{\lambda} [I - t_{i 0 \sigma}^{m_{\lambda i}} \mathcal{G}_{i 0, j l, \sigma}^{\lambda} t_{j l \sigma}^{m_{\lambda j}} \mathcal{G}_{j l, i 0, \sigma}^{\lambda}]^{-1} t_{i 0 \sigma}^{m_{\lambda i}} \mathcal{G}_{i 0, j l, \sigma}^{\lambda} t_{j l \sigma}^{m_{\lambda j}} (\mathcal{G}_{j l, i 0, \sigma}^{\lambda} + \mathcal{G}_{j l, i 0, \sigma}^{\lambda} t_{i 0 \sigma}^{m_{\lambda i}} \mathcal{G}_{i 0, i 0, \sigma}^{\lambda}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \mathcal{G}_{i 0, j l, \sigma}^{\lambda} [I - t_{j l \sigma}^{\lambda' m_{\lambda j}} \mathcal{G}_{j l, i 0, \sigma}^{\lambda} t_{i 0 \sigma}^{\lambda m_{\lambda i}} \mathcal{G}_{i 0, j l, \sigma}^{\lambda}]^{-1} t_{j l \sigma}^{\lambda' m_{\lambda j}} \times \right. \right.$$

$$\times \mathcal{G}_{jl,i0,\sigma}^0 t_{i0\sigma}^{\lambda m_{\lambda i}} \left(\mathcal{G}_{i0,i0,\sigma}^0 + \mathcal{G}_{i0,jl,\sigma}^0 t_{jl\sigma}^{\lambda' m_{\lambda' j}} \mathcal{G}_{jl,i0,\sigma}^0 \right) \Big] \Big\}^{\eta}, \quad (29)$$

где $P_{jl\ i0}^{\lambda' m_{\lambda' j} / \lambda m_{\lambda i}}$ — условная вероятность найти в узле (jl) атом сорта λ' с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda' j}$ при условии, что в узле $(i0)$ находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$; $t_{in}^{\lambda m_{\lambda i}}$ — матричный элемент одноцентрового оператора рассеяния для случая, когда в узле (in) находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$.

С целью упрощения численных расчетов считаем, что магнитное упорядочение в сплаве Fe–Co в большей мере определяется ориентацией магнитных моментов на узлах, нежели их абсолютными значениями, т.е. вероятность $P_{n_1 i_1}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1}}$ зависит только от направления локализованного в узле $(n_1 i_1)$ магнитного момента $m_{\lambda_1 i_1}$ и не зависит от сорта атома λ_1 в данном узле. Также считаем, что локализованный магнитный момент в каждом узле имеет только две проекции на ось квантования $m_{\lambda i} = \mu_{\lambda i}^+, \mu_{\lambda i}^-$, величина которых определяется как электрон-электронным взаимодействием, так и сортом атома в данном узле. Тогда в (29) можно положить, что $P_{n_1 i_1}^{\lambda m_{\lambda i}} = P_{n_1 i_1}^{\lambda} P_{n_1 i_1}^{m_{\lambda i}}$ и $P_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1} / \lambda_2 m_{\lambda_2 i_2}} = P_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^{\lambda_1 / \lambda_2} P_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1} / m_{\lambda_2 i_2}}$. Условные вероятности $P_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^{\lambda_1 / \lambda_2}$ и $P_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1} / m_{\lambda_2 i_2}}$ определяются параметрами парных межатомных корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^a$ и корреляций в ориентации магнитных моментов $\varepsilon_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^m = \varepsilon_{n_1 i_1\ n_2 i_2}^m \mu_{\lambda_1 i_1}^+ \mu_{\lambda_2 i_2}^+$ на соседних узлах кристаллической решетки, а также зависят от параметров дальнего атомного (η^a) и магнитного (η^m) порядков [9]. Как показывают расчеты свободной энергии F для сплава Fe_{0,5}Co_{0,5}, энергетически выгодным оказывается его ферромагнитное упорядочение, т.е. параметры магнитного порядка, реализующие минимум F , удовлетворяют условиям: $\eta^m = 0$ и $\varepsilon^m > 0$ (отличные от нуля значения η^m соответствуют антиферромагнетику с выделенными подрешетками, «родными» для магнитных моментов, направленных вдоль и против оси квантования [7]). Для ферромагнетика, каковым является сплав Fe_{0,5}Co_{0,5}, вероятность $P_{ni}^{m_{\lambda i}}$ того, что в узле (ni) проекция локализованного магнитного момента на ось z имеет знак $\text{sign}(m_{\lambda i}) = \mu^+, \mu^-$ определяется только концентрацией x_m узлов кристаллической решетки с дан-

ной проекцией локализованного магнитного момента: $P_{ni}^{m_{\lambda i}} = x_m$. В отсутствие внешнего магнитного поля (или иных причин, выделяющих некое пространственное направление) $x_{\mu^+} = x_{\mu^-} = 0,5$. При этом отсутствует намагниченность образца в целом. При численных расчетах равновесные значения локальных характеристик магнитной структуры определяются минимизацией свободной энергии по параметрам $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$ и η^m во всей области определения этих величин:

$$\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \eta^m} = 0. \quad (30)$$

Уровень Ферми ε_F системы определяется из уравнения

$$\langle Z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \varepsilon_F) g_e(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (31)$$

где $g_e(\varepsilon) = \frac{1}{v} \sum_{i, \gamma, \sigma, \lambda, m_{\lambda i}} P_{i_0}^{\lambda m_{\lambda i}} g_{i_0 \gamma \sigma}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon)$, а $\langle Z \rangle = \langle N_e \rangle / vN = c^A Z_A + c^B Z_B$ —

среднее число электронов на атом (Z_A, Z_B — числа электронов на атом компонентов A, B сплава).

Выражения (27)–(31) устанавливают связь между микроскопическим механизмом формирования атомного и магнитного порядков в сплаве и его электронной структурой, а также тепловыми колебаниями кристаллической решетки.

Для более детального исследования магнитного порядка необходимо знать вероятность $P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1} / m_{\lambda i_2}}$ найти в узле ($n_1 i_1$) локализованный магнитный момент с проекцией $m_{\lambda i_1}$ при условии, что в узле ($n_2 i_2$) находится локализованный магнитный момент с проекцией $m_{\lambda i_2}$.

При упоминавшемся выше условии независимости направления локализованных магнитных моментов от сорта атома в узле, т.е.

$\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$, условная вероятность $P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1} / m_{\lambda i_2}}$ связана с параметром парных магнитных корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1}^+ m_{\lambda i_2}^+}$ выражением [8]

$$P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1} / m_{\lambda i_2}} = P_{n_1 i_1}^{m_{\lambda i_1}} + \frac{\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1}^+ m_{\lambda i_2}^+}}{P_{n_2 i_2}^{m_{\lambda i_2}}} \left(\delta_{m_{\lambda i_1}, m_{\lambda i_1}^+} - \delta_{m_{\lambda i_1}, m_{\lambda i_1}^-} \right) \left(\delta_{m_{\lambda i_2}, m_{\lambda i_2}^+} - \delta_{m_{\lambda i_2}, m_{\lambda i_2}^-} \right). \quad (32)$$

Пренебрегая корреляциями в ориентации магнитных моментов на трех и более узлах кристаллической решетки, по равновесным значениям $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda i_1}^+ m_{\lambda i_2}^+}$ можно оценить размеры областей однородного

магнитного порядка («магнитных доменов») из условий

$$\frac{1}{2} \cong (P_{n_1 i_1}^{\mu^+ / \mu_{i_2}^+})^{k_{\uparrow}}, \quad \frac{1}{2} \cong (P_{n_1 i_1}^{\mu^- / \mu_{i_2}^-})^{k_{\downarrow}}, \quad (33)$$

где k_{\uparrow} и k_{\downarrow} — числа частиц с проекциями магнитных моментов, имеющими знак μ^+ и μ^- соответственно, отсчитываются от центра «домена» до его границы. Зная период решетки a , можно определить линейные размеры «магнитных доменов»

$$d_{\uparrow} = 2ak_{\uparrow} \cong 2a \frac{\ln(1/2)}{\ln(P_{n_1 i_1}^{\mu^+ / \mu_{i_2}^+})}, \quad d_{\downarrow} = 2ak_{\downarrow} \cong 2a \frac{\ln(1/2)}{\ln(P_{n_1 i_1}^{\mu^- / \mu_{i_2}^-})}. \quad (34)$$

4. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Магнитное фазовое состояние сплавов с сильными электронными корреляциями соответствует положению уровня Ферми относительно кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов [8]. Если уровень Ферми находится в центре указанной квазищели, то сплав является антиферромагнетиком, вне области квазищели — парамагнетиком. В случае, когда уровень Ферми лежит на краю квазищели в энергетическом спектре электронов, что имеет место для исследуемого сплава Fe_{0,5}Co_{0,5} (рис. 1), кристалл является ферромагнетиком. Фазовое состояние магнитных бинарных сплавов описывается параметрами корреляций атомной ($\eta^a, \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a$) и магнитной ($\eta^m, \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$) подсистем. При расчетах учтено, что для

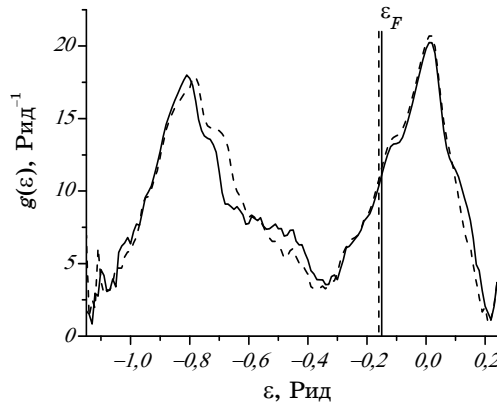


Рис. 1. Плотность электронных состояний сплава Fe_{0,5}Co_{0,5} для равновесных параметров системы при температурах 300 К (—) и 500 К (---).

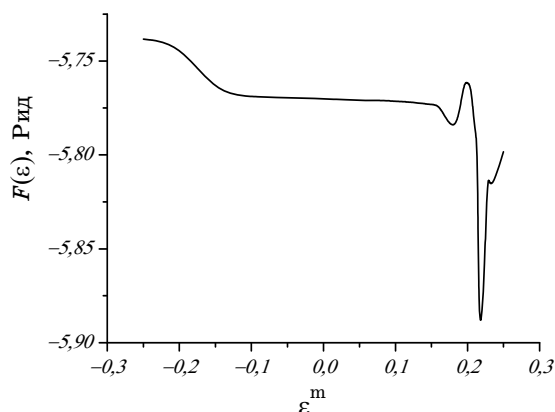


Рис. 2. Зависимость свободной энергии сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ от параметра парных магнитных корреляций ϵ^m при $T = 300 \text{ К}$ (для равновесного значения $\epsilon^a = -0,25$). Равновесное значение параметра ближнего магнитного порядка соответствует $\epsilon^m = 0,215$.

неупорядоченного сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ параметр дальнего атомного порядка $\eta^a = 0$. Равновесные значения параметров магнитных $\epsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$, η^m и межатомных $\epsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a$ корреляций получены из условия минимума свободной энергии (27), (30) по соответствующим параметрам (см. рис. 2). Как следует из расчетов, неупорядоченный сплав $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ при $T < 1200 \text{ К}$ является ферромагнетиком со значениями параметра парных межатомных корреляций, близкими к максимальному значению ближнего атомного порядка ($\epsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a = -0,25$).

Фазовые переходы сплавов с сильными электронными корреляциями обусловлены изменениями электронной структуры. Перестройка энергетического спектра электронов происходит при изменении температуры. Так, из рис. 1 видно, что с увеличением температуры кулоновская квазищель «замывается». Это связано как с рассеянием электронов на фонах (электрон-фононным взаимодействием), так и с уменьшением с ростом температуры величины локализованных магнитных моментов. Увеличение температуры приводит также к уменьшению параметра парных магнитных корреляций $\epsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$ (равновесные значения которого соответствуют ферромагнитной фазе, т.е. $\epsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m > 0$) вплоть до нулевого значения при достижении температуры $\cong 1200 \text{ К}$ (рис. 3). Это значение близко к экспериментальным значениям температуры Кюри (T_c) для сплава FeCo , составляющими порядка 1250 К [15, 16].

Используя рассчитанные при разных температурах равновесные

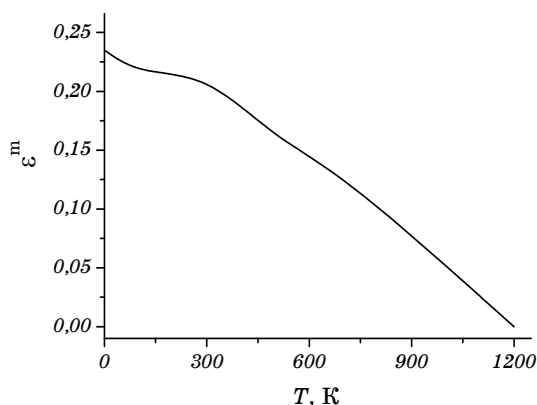


Рис. 3. Температурная зависимость равновесных значений параметра парных магнитных корреляций ϵ^m сплава Fe_{0,5}Co_{0,5}.

значения параметров парных магнитных корреляций $\epsilon_{n_1 i_1 n_2 j_2}^m$, при помощи формул (32), (34) можно оценить размеры «магнитных доменов» в сплаве Fe_{0,5}Co_{0,5} в диапазоне температур 0–1200 К. Из рисунка 4 видно, что с ростом температуры «магнитные домены» уменьшаются до практически нулевого размера при температурах в окрестности T_c ($d_{\uparrow} = d_{\downarrow} \equiv d$). Это связано с уменьшением корреляции в ориентации магнитных моментов (рис. 3).

Известно, что температура Кюри является точкой фазового перехода ферромагнетик–парамагнетик (магнитный порядок–беспорядок). Такой переход является следствием разрушения упорядочен-

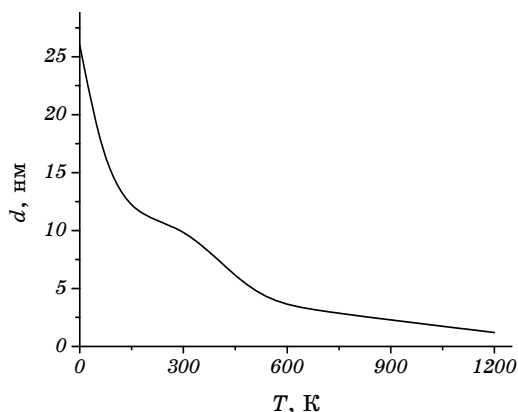


Рис. 4. Температурная зависимость линейных размеров d «магнитных доменов» сплава Fe_{0,5}Co_{0,5}.

ности в ориентации магнитных моментов атомов из-за тепловых колебаний атомов в узлах кристаллической решетки. Однако, в области температур, близких к температуре такого фазового перехода, существенную роль начинают играть корреляции более высоких порядков, нежели парные, а потому предложенный в данной работе метод становится практически неприменимым к исследованию близких окрестностей точек фазовых переходов типа магнитный порядок–беспорядок.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты хорошо согласуются с известными закономерностями изменения размеров «магнитных доменов» при изменении температуры. Размер «магнитного домена» при комнатной температуре, оцененный по параметру парных магнитных корреляций, близок к экспериментально определенному среднему размеру области однородности в неупорядоченном (закаленном от высоких температур) сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ [3]. Это указывает на применимость изложенной в данной работе теории энергетического спектра и термодинамического потенциала неупорядоченных систем к исследованию магнитных свойств сплавов переходных металлов.

Установлен микроскопический механизм магнитных фазовых превращений в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, связанный с положением уровня Ферми относительно кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов и перестройкой при повышении температуры самого спектра электронов, приводящей к уменьшению локализованных магнитных моментов и равновесных значений параметра корреляций в их ориентации.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. Orehotzky and K. Schroder, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **4**: 198 (1974).
2. M. S. Seehra and P. Silinsky, *Phys. Rev. B*, **13**, No. 12: 5183 (1976).
3. Ю. И. Устиновщиков, Б. Е. Пушкарев, И. Н. Шабанова, А. И. Ульянов, *Металлы*, № 5: 33 (2003).
4. Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *УФН*, **178**, № 1: 25 (2008).
5. A. Diaz-Ortiz, R. Drautz, M. Fahnle, H. Dosch, and J. M. Sanchez, *Phys. Rev. B*, **73**, No. 22: 224208 (2006).
6. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *ТМФ*, **131**, № 3: 456 (2002).
7. С. П. Репецкий, Т. С. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 9: 1143 (2006).
8. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 11: 1475 (2006).
9. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем. Электронные свойства сплавов* (Киев: Наукова думка: 1995).

10. С. П. Репецкий, В. А. Татаренко, И. Г. Вышиваная, И. Н. Мельник, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 6: 787 (2007).
11. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Москва: Физматгиз: 1962).
12. Н. Böttger, *Principles of the Theory of Lattice Dynamics* (Berlin: Akademie-Verlag: 1983).
13. И. З. Фишер, *Статистическая теория жидкостей* (Москва: Физматгиз: 1961).
14. S. P. Repetsky, N. P. Kulish, A. D. Borisov, and O. A. Godlevskaya, *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 11: 13 (1999).
15. F. Schreiber and Z. Frait, *Phys. Rev. B*, **54**, No. 9: 6473 (1996).
16. J. M. MacLaren, T. C. Schulthess, W. H. Butler, R. Sutton et al., *J. Appl. Phys.*, **85**, No. 8: 4833 (1999).