

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



С332.6
Д-533

У/и-73
Р4 - 6985

1990/2-73

К.Эльк

ВЫЧИСЛЕНИЕ АСФЕРИЧНОСТИ
МАГНИТНЫХ ФОРМФАКТОРОВ
В СИСТЕМЕ $Ni_{1-x}Fe_x$ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА
КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 6985

К.Эльк

ВЫЧИСЛЕНИЕ АСФЕРИЧНОСТИ
МАГНИТНЫХ ФОРМФАКТОРОВ
В СИСТЕМЕ $Ni_{1-x}Fe_x$ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА
КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Направлено в Письма ЖЭТФ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Клаус Эльк

P4 - 6985

Вычисление асферичности магнитных формфакторов в системе $Ni_{1-x}Fe_x$ с помощью метода когерентного потенциала

С использованием данных по расчету плотности состояний получен параметр асферичности в зависимости от концентрации. Результаты хорошо совпадают с экспериментами.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1973

Elk K.

P4 - 6985

Calculation of the Asphericity of Magnetic Formfactors in the System $Ni_{1-x}Fe_x$ Using the Coherent Potential Approximation

The parameter of the asphericity depending on the concentration is calculated using numerical results for the density of states. The obtained results agree well with experiments.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1973

Для сплавов переходных металлов Fe , Co , Ni известно большое количество экспериментальных данных о магнитных моментах и формфакторах ^{/1,2/}. Важной экспериментально измеряемой характеристикой является параметр асферичности, определяемый как

$$\gamma = \mu_{e_g} / \mu, \quad (1)$$

где μ_{e_g} - величина магнитного момента, определяемого электронами в состояниях e_g -типа, а μ - полный спиновый магнитный момент.

Эксперименты показывают, что измеряемые значения γ в зависимости от μ очень точно укладываются на прямую линию практически для всех сплавов этих переходных металлов ^{/3/}, т.е.

$$\gamma = a + b\mu. \quad (2)$$

Только для чистого Ni это не выполняется; γ_{Ni} значительно меньше величины, следующей из (2). Возможной причиной такого отклонения в случае чистого Ni может быть либо влияние корреляции электронов, либо специфика одночастичного поведения системы. В настоящей

работе рассмотрены только одночастичные свойства системы и показано, что влияние корреляции не очень существенно. Для вычисления плотности состояний сплава использовался метод когерентного потенциала (CPA)^{/4/}.

Рассматривалась область концентраций сплава $Ni_{1-x}Fe_x$ при $0 \leq x \leq 0,5$. Эта система уже рассматривалась в работе^{/5/} на основе метода CPA, причем вычислялись только магнитный момент μ и локальные моменты μ^{Ni} и μ^{Fe} . Эти результаты хорошо совпадают с экспериментами. Однако надо заметить, что в их работе использовалась не реальная плотность состояний, а сильно идеализированная функция и проблема решалась с использованием многих свободных параметров. В настоящей же работе впервые использовалась реальная теоретическая плотность состояний^{/6,7/}.

Для точного вычисления γ необходимо отдельно учитывать e_g - и t_{2g} -состояния. Вообще говоря, получить такие отдельные плотности состояний весьма сложно из-за сильной гибридизации этих состояний. Однако в точках и на линиях высокой симметрии, где гибридизация отсутствует, волновые функции можно точно отождествить с e_g - и t_{2g} -состояниями. Мы будем предполагать, что количественное поведение волновых функций не сильно изменяется при переходе к другим точкам. Используемая теоретическая плотность состояний^{/7/} состоит из 6 подзон, 2 из них связаны с s -электронами, а остальные 4 имеют в указанных точках и на линиях

высокой симметрии поведение плотности состояний электронов в t_{2g} - и e_g -состояниях. Поэтому можно предполагать приближенное разделение плотности состояний на составляющие для t_{2g} - и e_g -электронов. Эти 4 подзоны $D_i^{Ni}(\epsilon)$ ($i = t_{2g\uparrow}, e_{g\uparrow}, t_{2g\downarrow}, e_{g\downarrow}$) показаны на рис. 1. Плотности $D_i^{Ni}(\epsilon)$ нормированы на

$$z_i = \begin{cases} 3 \\ 2 \end{cases} \quad \text{для } i = \begin{cases} t_{2g\uparrow}, t_{2g\downarrow} \\ e_{g\uparrow}, e_{g\downarrow} \end{cases} \quad (3)$$

В методе CPA выражение для плотности состояний в системе $Ni_{1-x}Fe_x$ имеет вид

$$D_i^{CPA}(\epsilon) = -\frac{z_i}{\pi} \text{Im} G_i^{CPA}(\epsilon), \quad (4)$$

где

$$G_i^{CPA}(\epsilon) = \frac{1}{z_i} \int d\epsilon' \frac{D_i^{Ni}(\epsilon')}{\epsilon - W_i - \epsilon'}. \quad (5)$$

Здесь W_i - когерентный потенциал, определяемый из уравнения

$$W_i = x\Delta + W_i(\Delta - W_i)G_i^{CPA}(\epsilon), \quad (6)$$

а параметр Δ описывает сдвиг между атомными уровнями Fe и Ni. В работе^{/5/} этот параметр очень сильно зависит от спина ($\Delta^{\uparrow}/\Delta^{\downarrow} = 5,6$) и от концентрации. Мы, напротив, будем предполагать, что Δ практически не зависит от этих величин, чтобы последовательно провести учет одночастичных свойств модели. Параметр Δ выбирается таким образом, что локальное число электронов γ узлов Fe при нулевой концентрации $n^{Fe} = 7,20$ ($n^{Ni} = 9,44$)

и $\Delta = 0,0951 \text{ Ry}$. Это значение согласуется с локальным моментом Fe при нулевой концентрации $\mu^{Fe} = 2,82 \mu_B$. Поэтому при решении задачи можно обойтись без использования свободных параметров. Решение системы уравнений (5) и (6) встречает большие трудности вследствие нелинейности и сложной зависимости плотности $D_i^{Ni}(\epsilon)$ от энергии (рис. 1), что потребовало при расчете высокой точности на каждом шаге.

Полученные результаты для плотности состояний $D_i^{CPA}(\epsilon)$ и для локальных плотностей $D_i^{loc, Ni}(\epsilon)$ и $D_i^{loc, Fe}(\epsilon)$ для $i = t_{2g}$ и различных концентраций представлены на рис. 2. Полученный на основе этих результатов для $D_i^{CPA}(\epsilon)$ параметр асферичности γ показан на рис. 3. Наблюдается хорошее согласие для γ с экспериментальными результатами работы ^{/3/}, также указанными на рис. 3.

Интересно отметить, что результаты для вычисленных значений μ , μ^{Ni} и μ^{Fe} в рамках настоящей модели оказываются хуже, чем в работе ^{/5/}. Возможной причиной этого может быть влияние корреляций на значение μ , для описания которой в ^{/5/} использовались дополнительные свободные параметры. В то же время на основании рис. 3 можно сделать заключение, что поведение параметра асферичности γ хорошо объясняется уже на основе одночастичной плотности состояний.

Таким образом, предложенная модель вычисления электронных свойств неупорядоченных сплавов переходных

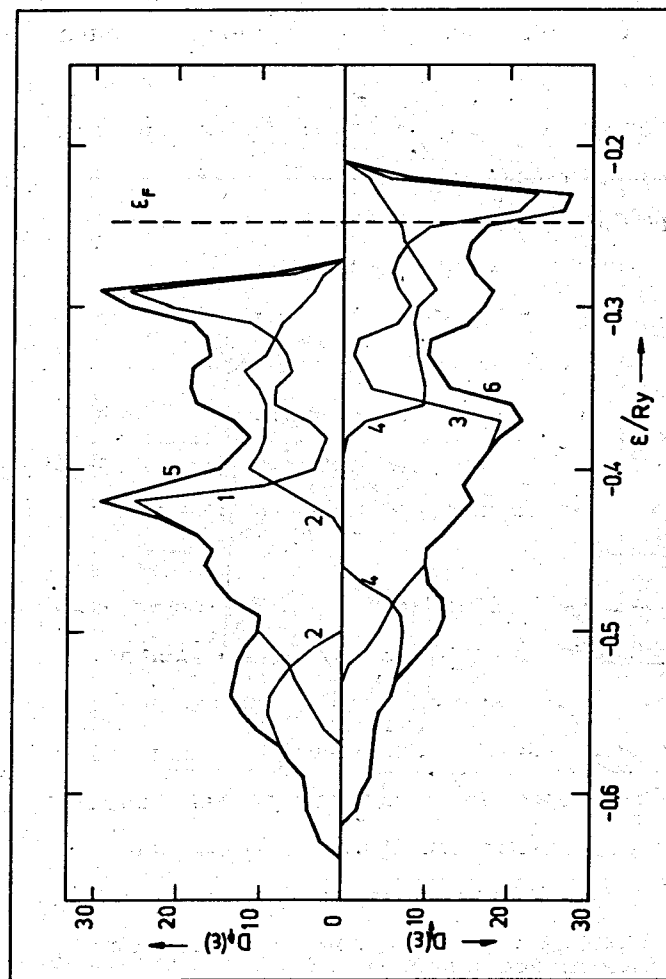


Рис. 1. Плотность состояний для чистого Ni
(1- $t_{2g} \uparrow$, 2- $e_g \uparrow$, 3- $t_{2g} \downarrow$, 4- $e_g \downarrow$, 5- $D \uparrow(\epsilon)$, 6- $D \downarrow(\epsilon)$).

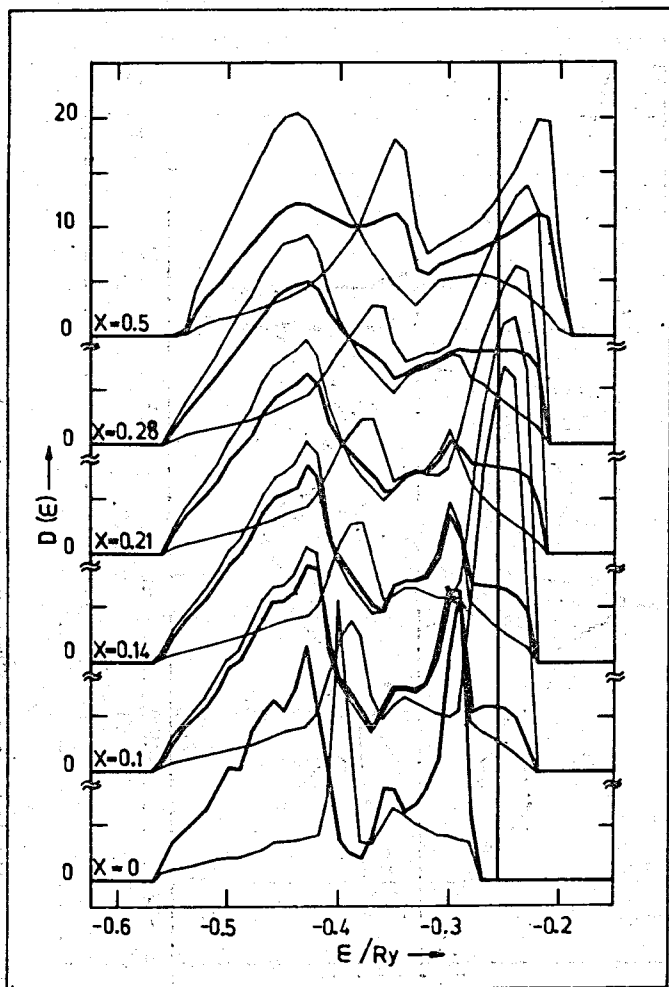


Рис. 2. Плотность состояний $D_i^{CPA}(\epsilon)$ (жирные кривые) и локальные плотности $D_i^{loc,Ni}(\epsilon)$ и $D_i^{loc,Fe}(\epsilon)$ (тонкие кривые) в зависимости от концентрации x в подзоне $i = t_{2g \uparrow}$.

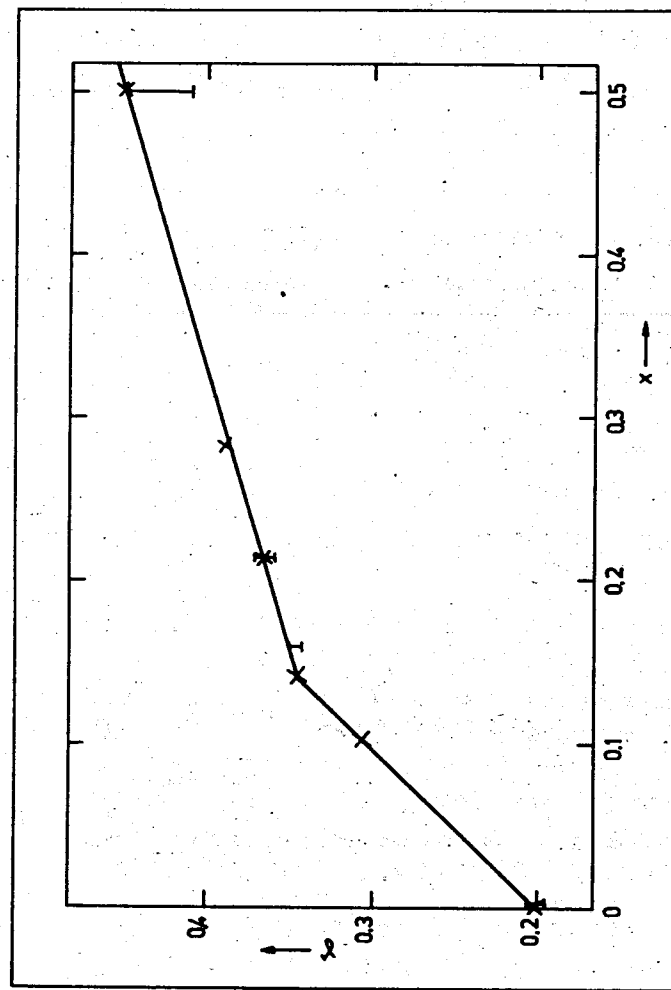


Рис. 3. Параметр асферичности γ в зависимости от концентрации x (x - результаты этой работы, Γ - результаты работы [3]).

металлов дает хорошие результаты для их одночастичных характеристик, причем вычисления проведены для плотности состояний, оптимально приближенной к реальной.

Автор выражает искреннюю благодарность В.Ёну, П.Цише, Х.Эшригу и А.Куземскому за полезные обсуждения, а также Л.Добжинскому и Чинг-Пинг-Вангу за предоставление результатов их исследований до опубликования. Численные расчеты были проведены на CDC-6200 ОИЯИ, Дубна.

Литература

1. C.G.Shull and M.K.Wilkinson. Phys.Rev., 97, 304 (1955).
2. M.F.Collins, R.V.Jones and R.D.Lowde, J.Phys.Soc. Japanese 17, 19 (1962).
3. Л.Добжински. Доклад на Осенней школе по магнетизму и рассеянию нейтронов, ноябрь 1972 г., Гауссиг, ГДР.
4. P.A.Soven. Phys.Rev., 156, 809 (1967).
5. H.Hasegawa and J.Kamamori. J.Phys.Soc. Japanese, 31, 382 (1971).
6. J.Callaway and H.M.Zhang. Phys.Rev. B, 1, 305 (1970); J.Langlinsais and J.Callaway. Phys.Rev. B, 5, 124 (1972).
7. Ching-ping Wang (to be published).

Рукопись поступила в издательский отдел
6 марта 1973 года.