

## ВЛИЯНИЕ СЛУЧАЙНОГО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ТЕМПЕРАТУРУ КЮРИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АНИЗОТРОПНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА

*М. В. Медведев, Е. В. Розенфельд\**

*Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук  
620049, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 17 ноября 1995 г.

Исследовано, как замещение немагнитных атомов одного сорта другими, приводящее к возникновению случайного кристаллического поля на окружающих магнитных ионах, влияет на температуру Кюри  $T_C$  кристаллического анизотропного ферромагнетика. Изучен случай малых концентраций, когда отдельные примеси замещения создают изолированные кластеры возмущенных магнитных ионов с дополнительными осями легкого или трудного намагничивания. Проанализированы разные варианты соотношения знаков параметров регулярной  $D$  и примесной  $d$  одноосных анизотропий второго порядка для ионов с крамеровскими  $J = 1$  и некрамеровскими  $J = 3/2$  моментами и показано, что, как правило, эффекты случайного кристаллического поля ведут к понижению температуры перехода  $T_C$  с увеличением концентрации немагнитных примесных атомов.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитные соединения типа  $RNi_5$ , где  $R$  — редкоземельные ионы, а ионы  $Ni$  не обладают локализованными магнитными моментами, являются удобными объектами для изучения эффектов магнитной анизотропии, так как в этих веществах энергия магнитокристаллической анизотропии сравнима с энергией обменного взаимодействия или превышает ее [1]. Недавно был исследован [2] ряд твердых растворов  $RNi_{5-x}Cu_x$  ( $R = Pr, Nd, Tb, Er$ ) и установлено, что в этих веществах, за исключением особого случая  $RtNi_{5-x}Cu_x$  [3], постепенное замещение ионов никеля ионами меди ведет к уменьшению спонтанной намагниченности и одновременному возрастанию температуры Кюри  $T_C$  по мере увеличения концентрации меди (с переходом  $T_C$  через максимум при достижении определенной концентрации).

Рост температуры Кюри по мере замещения одного типа немагнитных ионов на другой может быть вызван двумя причинами. Во-первых, это можно объяснить с помощью предположения об изменении числа электронов проводимости и соответствующего фермиевского волнового вектора  $k_F$ , который входит в выражение для рудерман-киттельевского интеграла косвенного обмена. Очевидно, что при определенных условиях изменение  $k_F$  может привести к увеличению ферромагнитного обменного взаимодействия. Во-вторых, можно попытаться связать рост температуры Кюри  $T_C$  с эффектами нарушения симметрии локального кристаллического окружения и появления дополнительных случайных источников кристаллического поля, действующих на ближайшие

---

\* Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, 620049, Екатеринбург, Россия.

магнитные атомы. В результате для некоторых магнитных атомов помимо уже существующих регулярных направлений легкого или трудного намагничивания появятся добавочные направления анизотропии, которые могут дополнительно ограничить подвижность магнитных моментов под действием тепловых флуктуаций и тем самым увеличить температуру Кюри.

Так как эффекты одновременного влияния регулярной и случайной магнитных анизотропий на концентрационное поведение температуры Кюри кристаллических ферромагнетиков недостаточно исследованы, то в настоящей работе мы попытаемся выяснить характер изменения  $T_C$  за счет эффектов случайного кристаллического поля. При этом на первоначальном этапе для оценки тенденций концентрационного поведения точки Кюри мы ограничимся случаем достаточно малых концентраций примесных источников случайного кристаллического поля. Это позволит считать, что области магнитных атомов, испытывающих воздействие случайного кристаллического поля, не перекрываются друг с другом и что каждый атом из такой отдельной области испытывает воздействие только одного примесного электрического заряда.

## 2. ГАМИЛЬТониАН ПРИМЕСНОЙ ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ

Предположим, что в анизотропном ферромагнетике магнитные атомы образуют одну магнитную подрешетку и что кристаллическое поле на магнитных ионах создается кулоновским потенциалом немагнитных ионов, расположенных в междоузлиях магнитной подрешетки. Пусть примесные немагнитные атомы замещают исходные немагнитные атомы и отличаются величиной своего заряда  $eZ_{imp}^{eff}$  от эффективного заряда остальных атомов  $eZ_{host}^{eff}$ . Тогда появление немагнитной примеси замещения в окрестности магнитного иона моделируется возникновением дополнительного заряда  $q$  в позиции немагнитного иона,

$$q = e(Z_{imp}^{eff} - Z_{host}^{eff}), \quad (1)$$

на фоне существующего симметричного распределения зарядов  $eZ_{host}^{eff}$ , ответственных за одноионную анизотропию исходного регулярного кристалла.

Выберем магнитный ион, вблизи которого расположен дополнительный заряд  $q$ , в качестве начала координат. Тогда, если радиус-вектор  $\mathbf{R} = (R \sin \theta \cos \psi, R \sin \theta \sin \psi, R \cos \theta)$  задает положение заряда  $q$  в лабораторной системе координат  $(X, Y, Z)$  и  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го электрона в незаполненной оболочке магнитного иона, то электрический потенциал  $V(\mathbf{r}_i)$  для модели точечного заряда  $q$  может быть разложен по степеням  $r_i/R$  [4]:

$$V(\mathbf{r}_i) = \frac{q}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} = \frac{q}{\sqrt{R^2 + r_i^2 - 2(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R})}} \simeq \frac{q}{R} + \frac{q(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R})}{R^2} + \frac{q}{2} \left[ \frac{3(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R})^2}{R^5} - \frac{r_i^2}{R^3} \right] + \dots \quad (2)$$

Суммируя действие этого потенциала на все электроны незаполненной оболочки и переходя к эквивалентному гамильтониану Стивенса [4], получим, что появление дополнительного заряда  $q$  ведет к появлению у окружающих его магнитных ионов добавочных вкладов в гамильтониан одноионной анизотропии вида

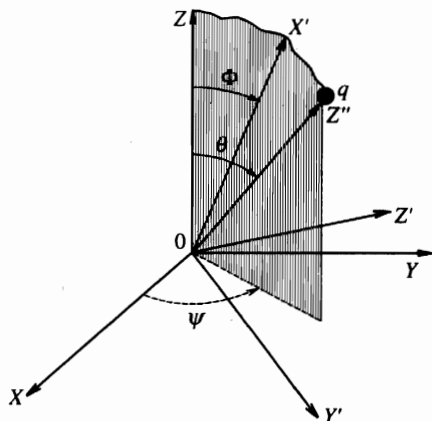


Рис. 1. Локальная система координат  $X'Y'Z'$ , удобная для диагонализации гамильтониана одноионной анизотропии

$$\Delta H_0^{(2)} = \text{const} - dJ_{Z''}^2 = \text{const} - d \left[ \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)J_Z^2 + \frac{1}{4} \sin 2\theta (\{J_+, J_Z\}e^{-i\psi} + \{J_-, J_Z\}e^{i\psi}) + \frac{1}{4} \sin^2 \theta (J_+^2 e^{-i2\psi} + J_-^2 e^{i2\psi}) \right]. \quad (3)$$

Здесь  $\text{const} = (1/6)(3 \cos^2 \theta - 1)J(J+1)d$ , и в модели точечного заряда, действующего на оболочки  $f$ -ионов, параметр  $d$  примесной одноионной анизотропии равен

$$d = 3|e|q\alpha_{2J}\langle r_f^2 \rangle / 4R^3. \quad (4)$$

Так как  $\alpha_{2J} > 0$  для Sm, Er, Tm, Yb и  $\alpha_{2J} < 0$  для Pr, Nd, Tb, Dy, Ho [5], то параметр  $d$  может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от сорта магнитного иона и знака дополнительного заряда  $q$ .

Выражение для  $\Delta H_0^{(2)}$  записано как в проекциях полного момента  $J$  на оси  $X, Y, Z$  лабораторной системы координат, так и в проекциях на ось  $Z''$  локальной системы координат, в которой эта ось направлена от магнитного иона к дополнительному заряду  $q$  (см. рис. 1). Кроме того, поскольку дополнительный заряд  $q$  действует не на один магнитный ион, а на целый кластер магнитных ионов, окружающих междоузлие с немагнитной примесью, то для каждого магнитного иона из этого кластера в гамильтониане (3) необходимо вводить свои координатные углы  $\theta$  и  $\psi$ . Наконец, отметим, что в (3) не включены члены более высокого порядка по степеням отношения  $\langle r_f \rangle / R$ , которые ведут к инвариантам четвертого и шестого порядков из проекций оператора момента  $J_\alpha$ , где  $\alpha = X, Y, Z$ .

### 3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛУЧАЙНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ

Предположим, что дополнительные заряды  $q$  ведут только к появлению добавочных вкладов (3) в одноионную анизотропию некоторых магнитных ионов кристалла и не меняют заметно величины обменного взаимодействия между магнитными моментами. Будем считать также, что кристаллическая симметрия исходного соединения допускает

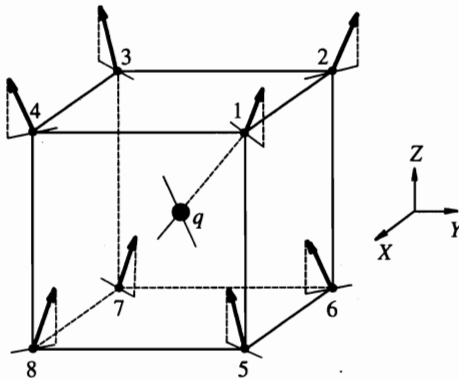


Рис. 2. Равновесные ориентации магнитных моментов кластерных узлов на псевдокубической решетке в случае  $D > 0$  (ферромагнетик типа «легкая ось» с намагниченностью вдоль  $Z$ ) и  $d > 0$  (дополнительные оси легкого намагничивания вдоль пространственных диагоналей куба)

сосуществование регулярной одноионной анизотропии второго порядка, которую выберем в простейшем виде  $-DJ_z^2$  ( $D > 0$  и  $D < 0$ ). Введем приближение случайного молекулярного поля для такой системы.

Предварительно отметим, что хотя формально локализованные магнитные моменты на всех магнитных узлах отвечают одному и тому же оператору момента  $J$ , термодинамические средние значения проекций оператора  $J_\alpha$  могут резко отличаться друг от друга на узлах, окружающих немагнитный примесный узел (такие узлы будем называть кластерными), и на узлах, не являющихся ближайшими соседями к дополнительному примесному заряду  $q$  (назовем такие узлы матричными). Это различие связано в первую очередь с резким различием кристаллических полей для ансамблей узлов соответствующего вида, тогда как различие, связанное с вариациями случайных молекулярных полей, будет менее существенным.

Тогда для одноузельного гамильтониана молекулярного поля для произвольного матричного узла  $m$  имеем

$$H_h(m) = H_{h,ex}(m) + H_{h,0}(m) = -\mathbf{J}(m)\mathbf{h}_h(m) - DJ_z^2(m), \tag{5}$$

а для кластерного узла  $n$  —

$$H_{cl}(n) = H_{cl,ex}(n) + H_{cl,0}(n) = -\mathbf{J}(n)\mathbf{h}_{cl}(n) - DJ_z^2(n) - dJ_{z''}^2(n). \tag{6}$$

Запись обменного вклада в форме скалярного произведения учитывает, что после появления добавочных локальных осей анизотропии равновесные ориентации магнитных моментов на разных узлах могут утратить коллинеарность.

Кроме того, если для простоты ограничиться приближением ближайших соседей для обменного взаимодействия, то при записи молекулярных полей для матричных  $\mathbf{h}_h(m)$  и кластерных  $\mathbf{h}_{cl}(n)$  узлов необходимо принять во внимание принципиальное отличие исследуемой системы от неупорядоченных магнитных сплавов. Это отличие состоит в том, что если для матричных узлов ближайшее магнитное окружение имеет случайный характер (ближайшие магнитные соседи с определенной вероятностью могут быть узлами как матричного, так и кластерного типа), то ближайшее магнитное окружение кластерного узла состоит из строго фиксированного числа матричных и кластерных узлов.

Например, на рис. 2 для иллюстрации представлена решетка кристалла, в котором магнитные ионы образуют простую орторомбическую кристаллическую подрешетку, в

которой различие между параметрами кристаллической решетки  $a \neq b \neq c$  столь мало, что она практически не отличается от кубической. Если в одно из междоузлий магнитной подрешетки поместить примесный заряд  $q$ , то его ближайшее магнитное окружение образует кластер из восьми магнитных атомов, расположенных в вершинах псевдокуба. При этом каждый кластерный узел имеет в качестве ближайших магнитных соседей всегда по три узла кластерного и три узла матричного типов.

С учетом этих замечаний молекулярное поле матричного узла  $m$  имеет вид

$$\mathbf{h}_h(m) = I \sum_{\delta=1}^z \{ [1 - p_{cl}(m + \delta)] \langle \mathbf{J}_h(m + \delta) \rangle + p_{cl}(m + \delta) \langle \mathbf{J}_{cl}(m + \delta) \rangle \}. \quad (7)$$

Здесь  $I$  — обменный интеграл между ближайшими соседями, сумма по  $\delta$  пробегает по  $z$  ближайшим магнитным соседям, оператор проектирования  $p_{cl}(m + \delta)$  равен

$$p_{cl}(m + \delta) = \begin{cases} 1, & \text{если узел } m + \delta \text{ является кластерным узлом,} \\ 0, & \text{если узел } m + \delta \text{ является матричным узлом} \end{cases} \quad (8)$$

и индексы  $h$  и  $cl$  введены для отличия термодинамических средних значений  $\langle \dots \rangle$  на узлах матричного и кластерного типа.

Пусть  $c_{cl}$  — вероятность того, что узел  $m + \delta$  является узлом кластерного типа при условии, что узел  $m$  — узел матричного типа. Тогда при усреднении операторов проектирования по концентрации получим

$$\overline{p_{cl}(m + \delta)} = c_{cl}. \quad (9)$$

Для конкретного типа решетки всегда можно установить связь условной вероятности  $c_{cl}$  с общей концентрацией магнитных атомов кластерного типа  $c$  и концентрацией немагнитных примесных атомов  $x$ . Например, в модели псевдокубической решетки (рис. 2) общая концентрация атомов кластерного типа равна  $c = z_1 x$ , так как каждый немагнитный атом окружен  $z_1$  магнитными атомами. Учитывая, что около каждого магнитного узла в свою очередь существует  $z_1 = 8$  междоузлий и что каждое междоузлие заполняется с вероятностью  $x$ , получим

$$\overline{p_{cl}(m + \delta)} \equiv c_{cl} = \frac{1}{2} z_1 x = \frac{1}{2} c. \quad (10)$$

Коэффициент  $1/2$  учитывает, что из  $z_1$  междоузлий около узла  $m + \delta$  можно заполнять немагнитными примесями только половину, так как другая половина междоузлий является общей для узлов  $m$  и  $m + \delta$  и их заполнение примесными атомами делает узел  $m$  также узлом кластерного типа (вместо матричного).

Для молекулярного поля кластерного узла  $n$  следует написать

$$\mathbf{h}_{cl}(m) = I \left[ \sum_{\Delta_{cl}=1}^{z_{cl}} \langle \mathbf{J}_{cl}(n + \delta_{cl}) \rangle + \sum_{\Delta_h=1}^{z_h} \langle \mathbf{J}_h(n + \delta_h) \rangle \right], \quad (11)$$

где  $z_{cl}$  и  $z_h$  — число ближайших соседей соответственно кластерного и матричного типа, причем

$$z_{cl} + z_h = z. \quad (12)$$

Чтобы исследовать концентрационное поведение температуры перехода из магнитоупорядоченного состояния в парамагнитное, с помощью (5) и (6) получим самосоглашенные линейные уравнения для  $\langle J_{cl}(n) \rangle$  и  $\langle J_h(m) \rangle$ . Для этого, рассматривая молекулярные обменные вклады в (5) и (6) как возмущение по отношению к гамильтонианам одноионной анизотропии, в рамках термодинамической теории возмущений найдем для  $\langle J_\alpha(g) \rangle$  ( $\alpha = X, Y, Z$  и индексы  $cl, h$  пока опускаем) на узле  $g$

$$\langle J_\alpha(g) \rangle = \sum_\gamma \chi_{\alpha\gamma}^0(g) h_\gamma(g), \tag{13}$$

где компоненты тензора локальной магнитной восприимчивости на узле  $g$  равны ( см., например, [5])

$$\chi_{\alpha\gamma}^0(g) = Q^{-1} \left\{ \beta_c \sum_i \langle i | J_\alpha(g) | i \rangle \langle i | J_\gamma(g) | i \rangle \exp \left[ -\beta_c E_i^{(0)}(g) \right] + \sum_{i \neq l} \frac{\langle i | J_\alpha(g) | l \rangle \langle l | J_\gamma(g) | i \rangle}{E_i^{(0)}(g) - E_l^{(0)}(g)} \left( \exp \left[ -\beta_c E_l^{(0)}(g) \right] - \exp \left[ -\beta_c E_i^{(0)}(g) \right] \right) \right\}, \tag{14}$$

$$Q = \sum_i \exp \left[ -\beta_c E_i^{(0)}(g) \right], \quad \beta_c = \frac{1}{T_C} \tag{15}$$

(наше определение тензора магнитной восприимчивости отличается от стандартного отсутствием множителя  $(gJ\mu_B)^2$ ).

Вычисление (14) требует знания собственных значений  $E_i^{(0)}(g)$  и собственных функций  $|i\rangle \equiv |\Psi_i\rangle$  нулевых гамильтонианов одноионной анизотропии

$$H_0(g) |\Psi_i\rangle = E_i^{(0)}(g) |\Psi_i\rangle, \quad |\Psi_i\rangle \equiv |i\rangle, \tag{16}$$

которые различаются для матричных и кластерных узлов. Оказывается, что для матричных узлов удобнее диагонализировать гамильтониан одноионной анизотропии с помощью базисных функций углового момента в лабораторной системе координат, тогда как для кластерного узла удобнее ввести новую локальную систему координат  $X', Y', Z'$ , которая позволяет легко диагонализировать гамильтониан одноионной анизотропии и вычислить компоненты тензора магнитной восприимчивости  $\chi_{\lambda\nu}^0(n)$  ( $\lambda, \nu = X', Y', Z'$ ), а уже потом перейти к компонентам тензора в лабораторной системе координат.

#### 4. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТониАНА ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ В СЛУЧАЕ ДВУХ ОСЕЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Рассмотрим гамильтониан одноионной анизотропии для узла кластерного типа

$$H_0 = -DJ_Z^2 - dJ_{Z''}^2, \tag{17}$$

причем направление оси  $Z''$  по отношению к лабораторной системе координат задано полярным углом  $\theta$  и азимутальным углом  $\psi$ . Введем новую систему координат таким образом, чтобы ось  $Z'$  была перпендикулярна плоскости, проведенной через оси  $Z$  и

$Z''$  (см. рис. 1). Тогда новые оси  $X'$  и  $Y'$  также лежат в плоскости, построенной на осях  $Z$  и  $Z''$ , и угол  $\Phi$  — полярный угол между осями  $Z$  и  $X'$ .

Выразим  $J_Z$  и  $J_{Z''}$  через проекции оператора  $J$  в этой новой системе координат

$$\begin{aligned} J_Z &= J_{X'} \cos \Phi - J_{Y'} \sin \Phi, \\ J_{Z''} &= J_{X'} \cos(\theta - \Phi) + J_{Y'} \sin(\theta - \Phi). \end{aligned} \quad (18)$$

После подстановки (18) в (17) и переходе к циркулярным проекциям  $J_{\pm'} = J_{X'} \pm J_{Y'}$ , гамильтониан одноионной анизотропии примет вид

$$H_0 = -\frac{D+d}{2} J(J+1) + \frac{1}{2}(D+d)J_{Z'}^2 - \frac{1}{4}e^{2i\Phi}[D+de^{-2i\theta}]J_{+'}^2 - \frac{1}{4}e^{-2i\Phi}[D+de^{2i\theta}]J_{-'}^2. \quad (19)$$

Если ввести новые обозначения

$$\epsilon = \frac{D+d}{2}, \quad \Delta = \frac{1}{4}\sqrt{D^2 + d^2 + 2Dd \cos 2\theta} \quad (20)$$

и вспомогательный угол  $\varphi$

$$\cos \varphi = \frac{D+d \cos 2\theta}{4\Delta}, \quad \sin \varphi = \frac{d \sin 2\theta}{4\Delta}, \quad (21)$$

то, опустив несущественный член  $\text{const} = -(1/2)(D+d)J(J+1)$ , вместо (19) получим

$$H_0 = \epsilon J_{Z'}^2 - \Delta [e^{i(2\Phi-\varphi)} J_{+'}^2 + e^{-i(2\Phi-\varphi)} J_{-'}^2]. \quad (22)$$

Из (22) видно, что на произвольный угол  $\Phi$  удобно наложить требование

$$\Phi = \frac{\varphi}{2}, \quad (23)$$

так как оно приводит (22) к наиболее простой форме

$$H_0 = \epsilon J_{Z'}^2 - \Delta [J_{+'}^2 + J_{-'}^2]. \quad (24)$$

Гамильтониан (24) может быть легко диагонализирован в аналитическом виде для случаев  $J = 1, 3/2$  и  $2$ , если в качестве базисных функций выбрать функции углового момента  $|J, J_{Z'}\rangle \equiv |J_{Z'}\rangle$  с проекциями углового момента на локальную ось координат  $Z'$ .

#### 4.1. Случай $J = 1$

Для  $J = 1$  спектр собственных значений  $E_i^{(0)}$  и собственные функции  $|\Psi_i\rangle$  имеют вид

$$\begin{aligned} E_1^{(0)} &= 0, & |\Psi_1\rangle &= |0\rangle, \\ E_2^{(0)} &= \epsilon + 2\Delta, & |\Psi_2\rangle &= (|1\rangle - |-1\rangle) / \sqrt{2}, \\ E_3^{(0)} &= \epsilon - 2\Delta, & |\Psi_3\rangle &= (|1\rangle + |-1\rangle) / \sqrt{2}. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, появление второй оси анизотропии расщепляет дублетный уровень, существующий для  $J = 1$  в случае одноосной анизотропии.

Тензор нулевой магнитной восприимчивости имеет только диагональные компоненты:

$$\chi_{X'X', Y'Y'}^0 = \frac{2 \{1 - \exp[-\beta_c(\epsilon \mp 2\Delta)]\}}{(\epsilon \mp 2\Delta) [1 + 2 \exp(-\beta_c \epsilon) \operatorname{ch}(2\beta_c \Delta)]}$$

(верхние знаки относятся к  $X'X'$  компоненте, нижние — к  $Y'Y'$ ),

$$\chi_{Z'Z'}^0 = \frac{\exp(-\beta_c \epsilon) \operatorname{sh}(2\beta_c \Delta)}{\Delta [1 + 2 \exp(-\beta_c \epsilon) \operatorname{ch}(2\beta_c \Delta)]}. \quad (26)$$

В пределе  $d \rightarrow 0$  (когда угол  $\Phi = 0$  или  $\pi/2$  в зависимости от знака  $D$ ) после соответствующего переобозначения осей координат можно получить тензор восприимчивости узлов матричного типа в лабораторной системе координат:

$$\chi_{XX}^0 = \chi_{YY}^0 = \frac{2 [1 - \exp(-\beta_c D)]}{D [2 + \exp(-\beta_c D)]}, \quad \chi_{ZZ}^0 = \frac{2\beta_c}{2 + \exp(-\beta_c D)}. \quad (27)$$

В другом предельном случае  $d \rightarrow \infty$ , когда  $\Phi = \varphi/2 = \theta$  и ось  $X'$  направлена на примесный заряд  $q$ , из (26) следует

$$\begin{aligned} \chi_{X'X'}^0(d \rightarrow \infty) &= \frac{2 \operatorname{th}(\frac{\beta_c D}{2} \sin^2 \theta)}{D \sin^2 \theta} = \\ &\simeq \begin{cases} \beta_c, & \beta_c |D| \sin^2 \theta \ll 1, \\ 2/|D| \sin^2 \theta = 2\beta_c/\beta_c |D| \sin^2 \theta \ll \beta_c, & \beta_c |D| \sin^2 \theta \gg 1, \end{cases} \\ \chi_{Y'Y'}^0(d \rightarrow \infty) &= \chi_{Z'Z'}^0(d \rightarrow \infty) = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

а для случая  $d \rightarrow -\infty$

$$\chi_{X'X'}^0(d \rightarrow -\infty) = \chi_{Y'Y'}^0(d \rightarrow -\infty) = \chi_{Z'Z'}^0(d \rightarrow -\infty) = 0. \quad (29)$$

#### 4.2. Случай $J = 3/2$

Для случая  $J = 3/2$  появление второй оси анизотропии не снимает двукратного вырождения дублетных уровней:

$$E_{1,2}^{(0)} = \frac{5}{4}\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2}, \quad E_{3,4}^{(0)} = \frac{5}{4}\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2}. \quad (30)$$

Соответствующие собственные функции можно взять в виде

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= a|3/2\rangle + b|-1/2\rangle, & |\Psi_2\rangle &= b|1/2\rangle + a|-3/2\rangle, \\ |\Psi_3\rangle &= b|3/2\rangle - a|-1/2\rangle, & |\Psi_4\rangle &= -a|1/2\rangle + b|-3/2\rangle, \end{aligned} \quad (31)$$

где коэффициенты  $a$  и  $b$  равны

$$\begin{Bmatrix} a \\ b \end{Bmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[ 1 \mp \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2}} \right]. \quad (32)$$

Компоненты тензора магнитной восприимчивости в локальной системе координат имеют вид



$$\begin{aligned} \chi_{X'X',Y'Y'}^0 &= \beta_c \frac{\epsilon^2 \pm 6\epsilon\Delta + 24\Delta^2}{2(\epsilon^2 + 12\Delta^2)} + \\ &+ \left[ \beta_c \frac{\epsilon \pm 6\Delta}{2\sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2}} + \frac{3(\epsilon \mp 2\Delta)^2}{4\sqrt{(\epsilon^2 + 12\Delta^2)^3}} \right] \text{th} \left( \beta_c \sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2} \right), \\ \chi_{Z'Z'}^0 &= \beta_c \frac{5\epsilon^2 + 12\Delta^2}{4(\epsilon^2 + 12\Delta^2)} + \frac{12\Delta^2 - \beta_c \epsilon (\epsilon^2 + 12\Delta^2)}{\sqrt{(\epsilon^2 + 12\Delta^2)^3}} \text{th} \left( \beta_c \sqrt{\epsilon^2 + 12\Delta^2} \right), \end{aligned} \quad (33)$$

а для матричных узлов кристалла после предельного перехода  $d \rightarrow 0$  и преобразования осей координат к лабораторной системе можно найти

$$\chi_{XX}^0 = \chi_{YY}^0 = \frac{1}{2}\beta_c + \frac{1}{2} \left( \frac{3}{2D} - \beta_c \right) \text{th}(\beta_c D), \quad \chi_{ZZ}^0 = \frac{5}{4}\beta_c + \beta_c \text{th}(\beta_c D). \quad (34)$$

Кроме того, в пределе  $d \rightarrow \infty$  имеем

$$\chi_{X'X'}^0(d \rightarrow \infty) = \frac{9}{4}\beta_c, \quad \chi_{Y'Y'}^0(d \rightarrow \infty) = \chi_{Z'Z'}^0(d \rightarrow \infty) = 0, \quad (35)$$

а в пределе  $d \rightarrow -\infty$  —

$$\chi_{X'X'}^0(d \rightarrow -\infty) = \chi_{Z'Z'}^0(d \rightarrow -\infty) = \beta_c, \quad \chi_{Y'Y'}^0(d \rightarrow -\infty) = \frac{1}{4}\beta_c. \quad (36)$$

Аналогичным образом можно также диагонализировать гамильтониан (24) для случая  $J = 2$ .

Полученные таким образом матричные элементы восприимчивости в локальных системах координат кластерных узлов следует преобразовать к матричным элементам в лабораторной системе координат с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \chi_{XX}^0 &= \cos^2 \psi \left( \chi_{X'X'}^0 \sin^2 \frac{\varphi}{2} + \chi_{Y'Y'}^0 \cos^2 \frac{\varphi}{2} \right) + \chi_{Z'Z'}^0 \sin^2 \psi, \\ \chi_{YY}^0 &= \sin^2 \psi \left( \chi_{X'X'}^0 \sin^2 \frac{\varphi}{2} + \chi_{Y'Y'}^0 \cos^2 \frac{\varphi}{2} \right) + \chi_{Z'Z'}^0 \cos^2 \psi, \\ \chi_{ZZ}^0 &= \chi_{X'X'}^0 \cos^2 \frac{\varphi}{2} + \chi_{Y'Y'}^0 \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \\ \chi_{XY}^0 &= \chi_{YX}^0 = \sin \psi \cos \psi \left[ \chi_{X'X'}^0 \sin^2 \frac{\varphi}{2} + \chi_{Y'Y'}^0 \cos^2 \frac{\varphi}{2} - \chi_{Z'Z'}^0 \right], \\ \chi_{XZ}^0 &= \chi_{ZX}^0 = \frac{1}{2} \cos \psi \sin \varphi (\chi_{X'X'}^0 - \chi_{Y'Y'}^0), \\ \chi_{YZ}^0 &= \chi_{ZY}^0 = \frac{1}{2} \sin \psi \sin \varphi (\chi_{X'X'}^0 - \chi_{Y'Y'}^0). \end{aligned} \quad (37)$$

Для каждого из магнитных атомов, входящих в кластер  $z_1$  ионов вокруг избыточного заряда  $q$ , необходимо использовать свои углы  $\psi$  и  $\varphi$ , однако для каждой конкретной решетки можно установить соотношения симметрии между углами и, следовательно, соотношения симметрии между матричными элементами  $\chi_{\alpha\gamma}^0$  разных кластерных узлов.

## 5. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ $T_C$ В МОДЕЛИ АНИЗОТРОПНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА С ПСЕВДОКУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ

Чтобы получить уравнение для температуры Кюри, необходимо усреднить бесконечную систему линейных уравнений (13) по концентрационному беспорядку, учи-

тывая, во-первых, различие между матричными и кластерными узлами и, во-вторых, различие в ориентациях магнитных моментов на разных узлах магнитного кластера. Для выполнения этой программы необходимо задать конкретный вид кристаллической структуры исходного регулярного кристалла, а также знаки параметров регулярной  $D$  и примесной  $d$  анизотропий.

В качестве примера рассмотрим уже упоминавшуюся выше псевдокубическую решетку магнитных ионов, в которой небольшие концентрации примесей замещения в позициях немагнитных атомов создают только один тип магнитных кластеров. Проанализируем сначала случай  $D > 0$  и  $d > 0$  — случай регулярной анизотропии типа «легкая ось» и дополнительной оси легкого намагничивания для каждого из кластерных узлов. Поскольку в регулярном кристалле и, следовательно, вдали от возмущающего примесного заряда магнитные моменты ориентированы вдоль оси  $Z$ , то магнитные моменты кластерных узлов стремятся выстроиться в равновесных направлениях между осью  $Z$  и пространственными диагоналями куба (см. рис. 2).

Усредняя (13) по ансамблю всех матричных узлов, получаем

$$\sigma_Z = \chi_{ZZ}^0 \overline{h_{Z,h}} = \chi_{ZZ}^0(A) I z \left[ (1 - c_{cl}) \sigma_Z + c_{cl} \frac{1}{z_1} \sum_{c=1}^8 \tau_Z(i) \right], \quad (38)$$

где черта сверху означает усреднение по конфигурационному беспорядку. Здесь  $\sigma_Z \equiv \langle J_{Z,h}(m) \rangle$  и учтена диагональность тензора магнитной восприимчивости  $\chi_{\alpha\gamma}^0(A)$  матричных узлов в лабораторной системе координат (мы будем обозначать буквой  $A$  узлы матричного типа и буквой  $B$  узлы кластерного типа). Кроме того, при усреднении молекулярного поля на матричном узле  $\overline{h_{Z,h}(m)}$  учтено, что если матричный узел имеет в качестве ближайшего соседа кластерный узел (вероятность такого события равна  $c_{cl}$ ), то надо еще дополнительно учесть, что произвольный кластерный узел может иметь ориентацию магнитного момента либо как на узле 1 на рис. 2 (вероятность такого события равна  $c_{cl}/z_1$ ), либо как на узле 2 и т.д. В связи с этим необходимо различать усредненные значения  $\tau_\alpha(i) \equiv \langle J_{\alpha,cl}(i) \rangle$  проекций магнитных моментов для разных узлов ( $i = 1, 2, \dots, 8$ ) магнитного кластера.

Усредняя уравнение (13) для всех узлов типа 1 в магнитных кластерах, можно написать уравнение

$$\tau_\alpha(1) \equiv \overline{\langle J_{\alpha,cl}(1) \rangle} = \sum_{\gamma=X,Y,Z} \chi_{\alpha\gamma}^0(B) \overline{h_{\gamma,cl}(1)}, \quad (39)$$

где учтена недиагональность тензора магнитной восприимчивости  $\chi_{\alpha\gamma}^0(B)$  кластерных узлов в лабораторной системе координат. При этом усреднение проекций молекулярного поля на кластерных узлах типа 1 дает

$$\overline{h_{\gamma,cl}(1)} = I [\tau_\gamma(2) + \tau_\gamma(4) + \tau_\gamma(5)], \quad \gamma = X, Y, \quad (40)$$

$$\overline{h_{Z,cl}(1)} = I [\tau_Z(2) + \tau_Z(4) + \tau_Z(5) + 3\sigma_Z]. \quad (41)$$

Заметим, что согласно (11) все проекции случайного молекулярного поля  $h_{\gamma,cl}(i)$  для кластерных узлов  $i = 1, \dots, 8$  содержат подмагничивающие вклады от магнитных моментов  $\langle J_{\gamma,h}(i + \delta_h) \rangle$  ближайших матричных узлов, так как вблизи неколлинеарного

магнитного кластера из-за его обменного воздействия на матрицу возникает некоторая неколлинеарность магнитной структуры матрицы.

Однако сразу видно, что кластерные магнитные моменты и магнитные моменты даже ближайших к кластеру магнитных узлов находятся в сильно различающихся физических условиях. Если, например, рассмотреть случай сильной примесной легкоосной анизотропии  $d \gg D \gg Iz$ , когда магнитные моменты кластера практически выстроены вдоль примесных осей легкого намагничивания и неколлинеарность магнитной структуры кластера максимально велика, то на каждый магнитный момент кластера действует очень сильное, направленное под углом к намагниченности кристалла, примесное кристаллическое поле  $\sim d$  и обменное поле со стороны  $z$  ближайших магнитных моментов, причем  $z/2$  из них являются моментами кластерного типа и сильно разориентированы по отношению к направлению дальнего ферромагнитного порядка. В то же время даже на ближайший к кластеру матричный магнитный момент действует регулярное кристаллическое поле  $\sim D$ , направленное вдоль направления дальнего ферромагнитного порядка, и обменные поля  $z$  ближайших соседей, из которых только один в нашей модели является соседом кластерного типа и поэтому заведомо сильно разориентирован. Очевидно, что неколлинеарность ориентации магнитных моментов даже ближайших магнитных соседей в матрице будет существенно слабее неколлинеарности магнитных моментов кластера (и тем более справедливо это замечание по отношению к матричным соседям второго порядка). Поэтому в качестве простейшего приближения мы примем предположение, что при усреднении  $\overline{h_{\gamma,cl}(i)}$  выполняется условие

$$\overline{\langle J_{Z,h}(i + \delta_h) \rangle} = \sigma_Z, \quad (42)$$

$$\overline{\langle J_{X,h}(i + \delta_h) \rangle} = \overline{\langle J_{Y,h}(i + \delta_h) \rangle} = 0. \quad (43)$$

Тем самым мы пренебрегаем вкладами от неколлинеарности ближайших матричных узлов, которая будет иметь характер спадающего ближнего порядка, но в то же время полностью учитываем неколлинеарность магнитных моментов кластера.

Разумеется, в качестве более точного приближения можно попытаться составить линеаризованные уравнения для проекций магнитных моментов на ближайших соседях матрицы (по отношению к кластеру) и учесть отличие от нуля усредненных значений  $X$ - и  $Y$ -проекций магнитных моментов на этих атомах, пренебрегая в то же время неколлинеарностью магнитных моментов на соседях второго порядка и т. д. Однако такой подход означает существенное увеличение числа параметров в задаче и числа взаимосвязанных уравнений, и поэтому мы его отложим на дальнейшее.

Чтобы не составлять аналогичные уравнения для  $\tau_\alpha(i) \equiv \overline{\langle J_{\alpha,cl}(i) \rangle}$  на остальных кластерных узлах  $i = 2, \dots, 8$ , можно учесть симметрию ориентации магнитных моментов в кластере избранного типа (см. рис. 2). Нетрудно увидеть, что она дает следующие связи между проекциями усредненных магнитных моментов разных узлов кластера:

$$\begin{aligned} \tau_Z &= \tau_Z(i), \quad i = 1, \dots, 8, \\ \tau_X &\equiv \tau_X(1) = -\tau_X(2) = -\tau_X(3) = \tau_X(4) = -\tau_X(5) = \tau_X(6) = \tau_X(7) = -\tau_X(8), \\ \tau_Y &\equiv \tau_Y(1) = \tau_Y(2) = -\tau_Y(3) = -\tau_Y(4) = -\tau_Y(5) = -\tau_Y(6) = \tau_Y(7) = \tau_Y(8), \\ \tau_X &= \tau_Y. \end{aligned} \quad (44)$$

Если также принять во внимание, что в рассматриваемой решетке для узла 1 азимутальный угол  $\psi_1$  равен  $5\pi/4$  и  $\sin \psi_1 = \cos \psi_1$ , то из (37) получим

$$\begin{aligned} \chi_{ZX}^0(B; 1) &= \chi_{ZY}^0(B; 1) \equiv \chi_{ZX}^0(B), \\ \chi_{XX}^0(B; 1) &= \chi_{YY}^0(B; 1) \equiv \chi_{XX}^0(B). \end{aligned} \tag{45}$$

Поэтому вместо уравнений (38) и (39)–(41) можно окончательно написать

$$\begin{aligned} [1 - Iz(1 - c_{cl})\chi_{ZZ}^0(A)] \sigma_Z - Izc_{cl}\chi_{ZZ}^0(A)\tau_Z &= 0, \\ -3I\chi_{ZZ}^0(B)\sigma_Z + [1 - 3I\chi_{ZZ}^0(B)] \tau_Z + 2I\chi_{ZX}^0(B)\tau_X &= 0, \\ -3I\chi_{XZ}^0(B)\sigma_Z - 3I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z + \{1 + I[\chi_{XX}^0(B) + \chi_{XY}^0(B)]\} \tau_X &= 0. \end{aligned} \tag{46}$$

В случае  $D < 0$  и  $d > 0$ , когда регулярный кристалл обладает ферромагнетизмом типа «легкая плоскость» и дальний порядок в матрице описывается параметром порядка  $\sigma_X = \langle J_{X,h}(m) \rangle \neq 0$ , магнитные моменты отдельного кластера стремятся выстроиться в равновесных направлениях между осью  $X$  — направлением намагниченности матрицы — и пространственными диагоналями псевдокуба — направлениями осей добавочной локальной анизотропии (рис. 3). Тогда для средних значений проекций оператора момента различных узлов кластера возникают следующие соотношения симметрии:

$$\begin{aligned} \tau_X &\equiv \tau_X(i) \quad i = 1, \dots, 8, \\ \tau_Y &\equiv \tau_Y(1) = -\tau_Y(2) = \tau_Y(3) = -\tau_Y(4) = \tau_Y(5) = -\tau_Y(6) = \tau_Y(7) = -\tau_Y(8), \\ \tau_Z &\equiv \tau_Z(1) = -\tau_Z(2) = -\tau_Z(3) = \tau_Z(4) = -\tau_Z(5) = \tau_Z(6) = \tau_Z(7) = -\tau_Z(8), \\ \tau_Y &\neq \tau_Z, \end{aligned} \tag{47}$$

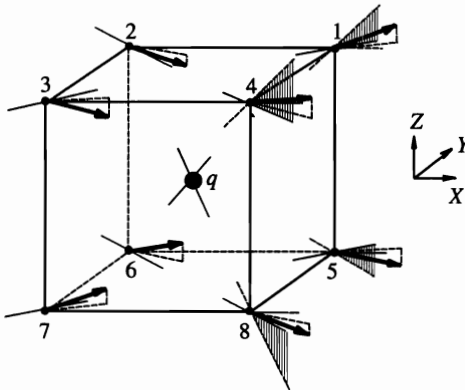


Рис. 3. Равновесные ориентации магнитных моментов в случае  $D < 0$  (ферромагнетик типа «легкая плоскость» с направлением спонтанной намагниченности вдоль оси  $X$ ) и  $d > 0$ . Для наглядности около узлов 1, 2, 5 и 6 заштрихованы плоскости, проходящие через пространственные диагонали куба и диагонали верхней и нижней грани

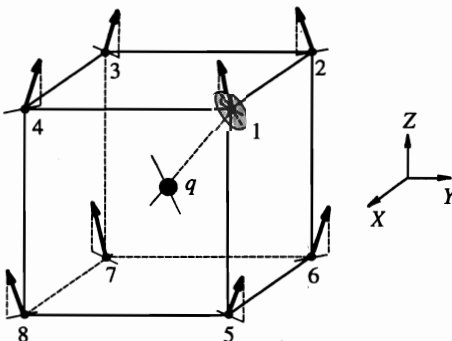


Рис. 4. Равновесные ориентации магнитных моментов кластерных узлов в случае  $D > 0$  (ферромагнетик типа «легкая ось») и  $d < 0$  — дополнительные плоскости легкого намагничивания, перпендикулярные пространственным диагоналям куба. Плоскость легкого намагничивания около узла 1 для наглядности выделена овалом

т. е. для описания намагниченности кластеров требуются три параметра порядка.

С учетом (45) это дает систему четырех связанных уравнений для определения  $T_C$ :

$$\begin{aligned} [1 - Iz(1 - c_{cl})\chi_{XX}^0(A)]\sigma_X - Izc_{cl}\chi_{XX}^0(A)\tau_X &= 0, \\ -3I\chi_{XX}^0(B)\sigma_X + [1 - 3I\chi_{XX}^0(B)]\tau_X + I\chi_{XY}^0(B)\tau_Y + I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z &= 0, \\ -3I\chi_{XY}^0(B)\sigma_X - 3I\chi_{XY}^0(B)\tau_X + [1 + I\chi_{XX}^0(B)]\tau_Y + I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z &= 0, \\ -3I\chi_{XZ}^0(B)\sigma_X - 3I\chi_{XZ}^0(B)\tau_X + I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Y + [1 + I\chi_{ZZ}^0(B)]\tau_Z &= 0. \end{aligned} \quad (48)$$

В случае  $D > 0$  и  $d < 0$  (в матрице — ферромагнетизм типа «легкая ось», и на кластерных узлах появляются дополнительные оси трудного намагничивания) равновесная ориентация магнитных моментов кластера порождается компромиссом между их стремлением подстроиться к направлению намагниченности кристалла вдоль оси  $Z$  и стремлением расположиться в плоскостях, перпендикулярных пространственным диагоналям куба. Это дает соотношения симметрии (рис. 4)

$$\begin{aligned} \tau_Z &= \tau_Z(i), \quad i = 1, \dots, 8, \\ \tau_X &\equiv -\tau_X(1) = \tau_X(2) = \tau_X(3) = -\tau_X(4) = \tau_X(5) = -\tau_X(6) = -\tau_X(7) = \tau_X(8), \\ \tau_Y &\equiv -\tau_Y(1) = -\tau_Y(2) = \tau_Y(3) = \tau_Y(4) = \tau_Y(5) = \tau_Y(6) = -\tau_Y(7) = -\tau_Y(8), \\ \tau_X &= \tau_Y \end{aligned} \quad (49)$$

и уравнение для нахождения  $T_C$  в виде

$$\begin{aligned} [1 - Iz(1 - c_{cl})\chi_{ZZ}^0(A)]\sigma_Z - Izc_{cl}\chi_{ZZ}^0(A)\tau_Z &= 0, \\ -3I\chi_{ZZ}^0(B)\sigma_Z + [1 - 3I\chi_{ZZ}^0(B)]\tau_Z - 2I\chi_{ZX}^0(B)\tau_X &= 0, \\ 3I\chi_{XZ}^0(B)\sigma_Z + 3I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z + [1 + I(\chi_{XX}^0(B) + \chi_{XY}^0(B))] \tau_X &= 0. \end{aligned} \quad (50)$$

Наконец, случай  $D < 0$  и  $d < 0$  (существование двух направлений трудного намагничивания для кластерных узлов при одновременной ориентации спонтанной намагниченности матрицы вдоль оси  $X$ ) даст четыре связанных уравнения для определения  $T_C$ :

$$\begin{aligned} [1 - Iz(1 - c_{cl})\chi_{XX}^0(A)]\sigma_X - Izc_{cl}\chi_{XX}^0(A)\tau_X &= 0, \\ -3I\chi_{XX}^0(B)\sigma_X + [1 - 3I\chi_{XX}^0(B)]\tau_X - I\chi_{XY}^0(B)\tau_Y - I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z &= 0, \\ 3I\chi_{XY}^0(B)\sigma_X + 3I\chi_{XY}^0(B)\tau_X + [1 + I\chi_{XX}^0(B)]\tau_Y + I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Z &= 0, \\ 3I\chi_{XZ}^0(B)\sigma_X + 3I\chi_{XZ}^0(B)\tau_X + I\chi_{XZ}^0(B)\tau_Y + [1 + I\chi_{ZZ}^0(B)]\tau_Z &= 0. \end{aligned} \quad (51)$$

## 6. ТЕМПЕРАТУРА КЮРИ $T_C$ В ПРЕДЕЛЕ БЕСКОНЕЧНО-СИЛЬНОЙ ПРИМЕСНОЙ АНИЗОТРОПИИ

Системы уравнений (46), (48), (50) и (51) относительно  $T_C$  могут быть решены при разных вариантах численных соотношений параметров  $D$  и  $d$ . Однако очевидно, что магнитные кластеры будут оказывать наибольшее влияние на температуру  $T_C$  в том случае, когда параметр  $|d|$  примесного кристаллического поля будет максимально велик по

сравнению с  $|D|$ . Поэтому для понимания тенденций влияния кластеров на температуру магнитного упорядочения рассмотрим предельные случаи с  $d \rightarrow \infty$  и  $d \rightarrow -\infty$  на кластерных узлах.

При  $J = 1$  и  $d \rightarrow -\infty$  с учетом (29) получаем уравнение

$$1 - Iz(1 - c_{cl})\chi_{\alpha\alpha}^0(A) = 0, \tag{52}$$

где  $\alpha = Z$  для  $D > 0$  и  $\alpha = X$  для  $D < 0$ . Следовательно, в случае  $d \rightarrow -\infty$  ионы кластера начинают выступать в роли немагнитного разбавителя регулярной ферромагнитной матрицы, так как они эффективно ослабляют обменное взаимодействие  $Iz \rightarrow Iz(1 - c_{cl})$  и это обстоятельство только ведет к уменьшению  $T_C$ .

При  $J = 1$  и  $d \rightarrow \infty$  с учетом (28) и  $\sin^2 \theta = 2/3$  при переходе к лабораторной системе координат следует

$$\chi_{\alpha\gamma}^0(B) = \frac{1}{3}\chi_{X'X'}^0(B, d \rightarrow \infty) = \frac{1}{D} \operatorname{th} \left( \frac{\beta_c D}{3} \right) \equiv \chi_0(B) \tag{53}$$

для всех  $\alpha, \gamma = X, Y, Z$ . В результате из (46) и (48) получается уравнение

$$1 - Iz \left[ 1 - c_{cl} + c_{cl} \frac{3I\chi_0(B)}{1 - I\chi_0(B)} \right] \chi_{\alpha\alpha}^0(A) = 0, \tag{54}$$

где  $\alpha = Z$  в случае  $D > 0$  и  $\alpha = X$  для  $D < 0$ .

Если рассмотреть ферромагнетик типа «легкая ось» ( $D > 0$ ), то в случае слабой анизотропии матрицы,  $D/Iz \sim D\beta_c \ll 1$ , уравнение (54) может быть решено аналитически:

$$T_C \approx 4I \left( 1 - \frac{8}{11}c_{cl} \right) + \frac{D}{3}. \tag{55}$$

Таким образом, даже в наиболее благоприятном варианте с точки зрения заметности влияния сильноанизотропного кластера на температуру перехода будет наблюдаться только уменьшение  $T_C$ . Физическая причина, по-видимому, связана с тем, что в рассмотренной модели кластера оказывает существенное влияние геометрический фактор, а именно, большой полярный угол  $\theta$  между осью  $Z$  легкого намагничивания матрицы и пространственной диагональю куба. Это приводит к тому, что восприимчивость кластерных узлов вдоль лабораторной оси  $Z$  даже в пределе  $d \rightarrow \infty$  и  $D \rightarrow 0$   $\chi_{ZZ}^0(B) = (1/3)\beta_c$  оказывается меньше восприимчивости матричных узлов (в пределе  $D \rightarrow 0$  будет  $\chi_{ZZ}^0(A) = (2/3)\beta_c$ ), и поэтому кластерные узлы только ослабляют вклад обменных связей в жесткость магнитной системы вдоль направления спонтанного намагничивания.

Более интересным представляется случай ферромагнетизма типа «легкая плоскость» в матрице, так как известно, что при достаточно сильной анизотропии  $|D| > 0$  по сравнению с параметром обменной связи  $I$  происходит резкое снижение  $T_C$  в матрице и даже переход в немагнитное состояние (при  $J = 1$  это происходит при  $|D|/I = 12$ ). Поэтому, казалось бы, можно ожидать, что вблизи порога перехода в синглетное состояние кластеры могут повышать  $T_C$ .

Однако из (28) видно, что при росте отношения  $|D|/I$  происходит одновременное уменьшение восприимчивости кластерных магнитных моментов  $\chi_{X'X'}^0(d \rightarrow \infty)$  и соответственно  $\chi_0(B)$ , причем поведение магнитного момента все сильнее отклоняется от

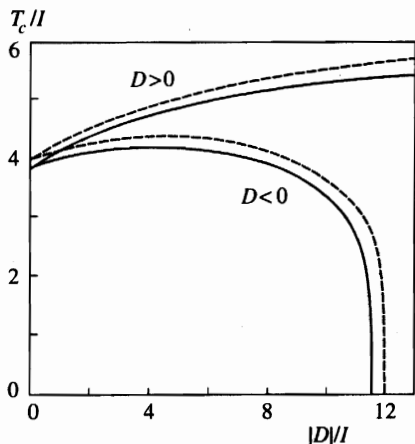


Рис. 5. Зависимость температуры Кюри (в безразмерных единицах  $T_C/I$ ) ферромагнетиков типов «легкая ось» ( $D > 0$ ) и «легкая плоскость» ( $D < 0$ ) при  $J = 1$  от величины параметра регулярной анизотропии  $|D|/I$  в исходных кристаллах (штриховые кривые) и в кристаллах с конечной концентрацией кластерных узлов ( $c_{cl} = 0.05$ ) в случае  $d \rightarrow \infty$ . Условная вероятность  $c_{cl} = 0.05$  для псевдокубической решетки отвечает концентрации кластерных узлов  $c = 0.10$  или концентрации немагнитных примесей  $x = 0.0125$

изинговского. В результате  $T_C$  только уменьшается по сравнению с точкой Кюри исходного кристалла. Это подтверждается численными расчетами уравнения (54), результаты которых представлены на рис. 5. Видно, что при всех соотношениях  $|D|/I$  как в случае ферромагнетика типа «легкая плоскость» ( $D < 0$ ), так и в случае ферромагнетика типа «легкая ось» ( $D > 0$ ) для фиксированной концентрации кластерных узлов величина  $T_C$  примесного кристалла лежит ниже  $T_{C0}$  исходного регулярного анизотропного ферромагнетика.

Отсутствие повышения  $T_C$  для случая  $J = 1$  связано с расщеплением основного дублета  $|\pm 1\rangle$  за счет регулярной анизотропии кристалла  $D$ . Совершенно очевидно, что для моментов с  $J > 1$ , когда в основном состоянии при  $d \rightarrow \infty$  будет дублет  $|\pm J\rangle$ , регулярная анизотропия второго порядка не сможет расщепить дублет. Тогда в пределе  $d \rightarrow \infty$  будет  $\chi_{X'X'}^0(d \rightarrow \infty) = J^2\beta_c$ , и для целочисленных моментов  $J = 2, 4, \dots$  восприимчивость кластерных узлов может стать больше восприимчивости матричных узлов вблизи порога перехода в синглетное состояние. Это допускает возможность повышения  $T_C$  за счет появления кластеров с сильной примесной анизотропией, однако детальный анализ такой околопороговой ситуации требует более точного подхода, чем приближение молекулярного поля, ибо его точность имеет порядок  $\sim z^{-1}$ .

Для крамеровского иона с  $J = 3/2$  предельно сильная примесная анизотропия кластерных узлов дает в случае  $d \rightarrow \infty$

$$\chi_{\alpha\beta}^0(B, d \rightarrow \infty) = \frac{3}{4}\beta_c \quad \text{для } \alpha, \beta = X, Y, Z, \tag{56}$$

а в случае  $d \rightarrow -\infty$

$$\begin{aligned} \chi_{XX}^0(B, d \rightarrow -\infty) &= \chi_{YY}^0(B, d \rightarrow -\infty) = \chi_{ZZ}^0(B, d \rightarrow -\infty) = \frac{3}{4}\beta_c, \\ \chi_{XY}^0(B, d \rightarrow -\infty) &= \chi_{YZ}^0(B, d \rightarrow -\infty) = \chi_{XZ}^0(B, d \rightarrow -\infty) = -\frac{1}{4}\beta_c. \end{aligned} \tag{57}$$

Это приводит к уравнениям для температуры перехода для  $d \rightarrow \infty$

$$1 - Iz \left( 1 - c_{cl} + \frac{9I\beta_c}{4 - 3I\beta_c} c_{cl} \right) \chi_{\alpha\alpha}^0(A) = 0 \tag{58}$$

и для  $d \rightarrow -\infty$

$$1 - Iz \left[ 1 - c_{cl} + \frac{3I\beta_c(3 + I\beta_c)}{4 - 7I\beta_c - 3(I\beta_c)^2} c_{cl} \right] \chi_{\alpha\alpha}^0(A) = 0, \quad (59)$$

где  $\alpha = Z$  в случае легкоосного ферромагнетика ( $D > 0$ ) и  $\alpha = X$  в случае легкоплоскостного ферромагнетика ( $D < 0$ ).

Уравнения (58) и (59) в случае  $c_{cl} \ll 1$  легко решаются аналитически в пределах слабой  $|D|/I \ll 1$  и сильной  $|D|/I \gg 1$  анизотропий и для всех четырех вариантов соотношений знаков параметров  $D$  и  $d$  дают уменьшение  $T_C$  с ростом  $c_{cl}$ . Например, в случае  $D < 0$  и  $d \rightarrow \infty$  получаем

$$T_C = \begin{cases} \frac{15}{2}I \left( 1 - \frac{2}{3}c_{cl} \right) + \frac{2}{5}|D|, & \frac{|D|}{I} \ll 1, \\ 6I \left( 1 - \frac{4}{7}c_{cl} \right) + 27 \frac{I^2}{|D|}, & \frac{|D|}{I} \gg 1. \end{cases} \quad (60)$$

Причина этого очевидна: даже в пределе  $D \rightarrow -\infty$  для  $J = 3/2$  восприимчивость матричных узлов не падает ниже  $\chi_{XX}^0(A) = \beta_c$ , тогда как, например, восприимчивость кластерных узлов  $\chi_{\alpha\beta}^0(B)$  не превышает  $(3/4)\beta_c$ .

Кроме того, поскольку при  $d \rightarrow -\infty$  и  $J = 3/2$  кластерные узлы не переходят в немагнитное состояние, хотя их восприимчивость и убывает, уменьшение  $T_C$  во всем образце с концентрацией происходит более медленно, чем при простом разбавлении ферромагнитной матрицы диамагнитными атомами. Например, для  $D < 0$  и  $d \rightarrow -\infty$  имеем

$$T_C = \begin{cases} \frac{15}{2}I \left( 1 - \frac{66}{113}c_{cl} \right) + \frac{2}{5}|D|, & \frac{|D|}{I} \ll 1, \\ 6I \left( 1 - \frac{14}{33}c_{cl} \right) + 27 \frac{I^2}{|D|}, & \frac{|D|}{I} \gg 1, \end{cases} \quad (61)$$

т. е. концентрационный множитель имеет вид  $1 - Ac_{cl}$  вместо множителя  $1 - c_{cl}$ , отвечающего простому диамагнитному разбавлению.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В проведенных расчетах была использована такая решетка регулярного кристалла, в которой угол  $\theta$  между осью регулярной анизотропии  $Z$  и осью случайной анизотропии  $Z''$  довольно велик ( $\sim 55^\circ$ ). Поскольку даже предельно сильная примесная анизотропия типа «легкая ось» ( $d \rightarrow \infty$ ) увеличивает восприимчивость кластерных узлов (в локальной системе координат) только до определенных пределов, при переходе к осям лабораторной системы координат срабатывает геометрический фактор большого угла, который понижает восприимчивость кластерных магнитных ионов по сравнению с матричными. Поэтому температура  $T_C$ , отвечающая возникновению спонтанной намагниченности вдоль одной из лабораторных осей координат, будет уменьшаться.

Таким образом, повышение точки Кюри  $T_C$  за счет появления дополнительных осей анизотропии при нарушении локальной симметрии окружения можно ожидать, по-видимому, только в случае, когда дополнительные примесные заряды создают новые



направления легкого намагничивания под небольшими углами к направлениям легкого намагничивания исходного кристалла.

В последнем случае эффект повышения  $T_C$  за счет дополнительных примесных легкоосных вкладов становится подобным эффекту влияния кристаллического поля на температуру магнитного упорядочения  $T_C$  в регулярных ферромагнетиках. Известно, что регулярная одноионная анизотропия второго порядка типа «легкая ось» ведет к повышению  $T_C$  по сравнению с  $T_C$  изотропного ферромагнетика. Для магнитного момента  $J = 1$  этот результат был получен как в различных модификациях метода двухвременных температурных функций Грина (см., например, [6, 7]), так и в рамках диаграммной техники [8, 9], а для значений магнитного момента от  $J = 1$  до  $J = 7/2$  это было установлено в рамках так называемой корреляционной теории молекулярного поля [10] (подробный обзор этой проблемы для регулярных ферромагнетиков дан в монографии [5]). Отличие нашей ситуации от ситуации регулярного ферромагнетика заключается только в том, что примесные источники кристаллического поля типа «легкая ось» будут увеличивать значение локальной магнитной восприимчивости (в лабораторной системе координат) только на  $N_C$  кластерных узлах магнитной решетки, и поэтому эффект повышения температуры  $\Delta T_C$  будет пропорционален концентрации кластерных узлов  $c$ .

В заключение отметим два обстоятельства. Во-первых, появление дополнительных осей локальной анизотропии и разориентация магнитных моментов около примесных источников кристаллического поля ведет также к падению спонтанной намагниченности. Это падение будет резким даже в области малых концентраций  $x$  немагнитных атомов, так как оно вовлекает в себя  $\sim z_1 x$  магнитных ионов. Во-вторых, при более высоких концентрациях  $x$  немагнитных атомов около каждого магнитного иона могут появиться случайные конфигурации из двух, трех и т. д. примесных зарядов, а конечные кластеры возмущенных магнитных ионов начинают перекрываться и образовывать бесконечный кластер. Ситуация будет напоминать модель аморфного магнетика с хаотической анизотропией, однако отличие будет проявляться в том, что в нашем случае дополнительные оси случайной анизотропии будут иметь счетное число направлений и что эффекты случайной анизотропии будут разыгрываться на фоне регулярной анизотропии кристалла.

Авторы выражают глубокую благодарность А. С. Ермоленко и А. Г. Кучину за ознакомление с экспериментальными данными и обсуждение результатов. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 95-02-03664) и Международным научным фондом (грант RG 7300).

## Литература

1. W. E. Wallace, *Rare Earth Intermetallics*, Academic Press, New York-London (1973).
2. А. Г. Кучин, А. С. Ермоленко, В. И. Храбров и др., ФММ **79**(3), 48 (1995).
3. А. Г. Кучин, А. С. Ермоленко, В. И. Храбров и др., ФММ, **81**(2), 54 (1996).
4. M. T. Hutchings, in *Solid State Physics*, Academic Press, New York-London (1964), Vol. 16, p. 227.
5. А. К. Звездин, В. М. Матвеев, А. А. Мухин, А. И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах*, Наука, Москва (1985).
6. J. F. Devlin, *Phys. Rev. B* **4**, 136 (1971).
7. M. Tanaka and Y. Kondo, *Progr. Theor. Phys.* **48**, 1815 (1972).
8. D. H. Yang and Y. L. Wang, *Phys. Rev. B* **10**, 4714 (1974).
9. D. H. Yang and Y. L. Wang, *Phys. Rev. B* **12**, 1057 (1975).
10. M. E. Lines, *Phys. Rev. B* **12**, 3766 (1975).