

**В. И. Анисимов, В. П. Антропов, В. А. Губанов, М. И. Кацнельсон, А. И. Лихтенштейн.** Зонная теория магнетизма металлов и сплавов. Проблема ферро- и антиферромагнетизма переходных металлов и их сплавов, в особенности сочетания черт локализованного и коллективизированного поведения магнитных электронов, остается одной из

труднейших задач теории твердого тела. Хотя она была ясно сформулирована еще в 30-е годы в работах Ф. Блоха, Дж. Слэтера, С. П. Шубина и С. В. Вонсовского, Е. Стонера и др.<sup>1</sup>, существенное продвижение в ее решении произошло лишь в конце 70-х годов в связи с развитием спин-флуктуационных теорий магнетизма<sup>2</sup>. Однако эти подходы опираются на ряд предположений

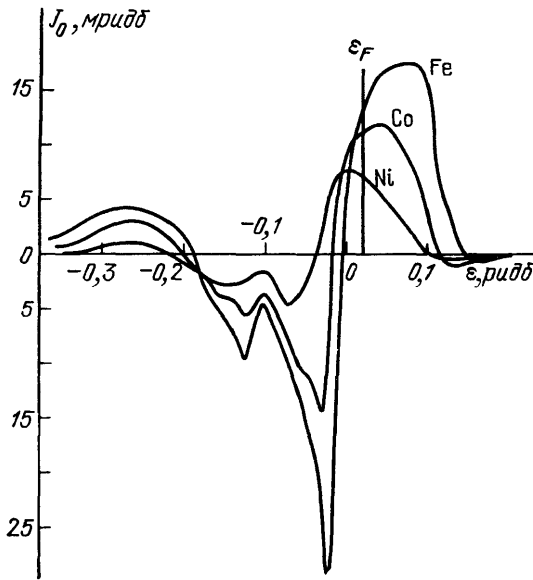


Рис. 1. Зависимость обменного параметра  $J_0$  от энергии Ферми для примесей в ГПУ фазе ферромагнитного кобальта

модельного характера и используют подгоночные параметры, что резко ограничивает их возможности для объяснения и предсказания магнитных свойств реальных веществ, в особенности сплавов и сложных интерметаллических соединений. Только в последнее время появились полностью неэмпирические подходы в зонной теории магнетизма, позволяющие рассчитывать характеристики магнитных взаимодействий и связанные с ними свойства конкретных материалов<sup>3-6</sup>. Многочисленные зонные расчеты основного состояния ферромагнитных металлов и разбавленных сплавов в приближении локального функционала спиновой плотности демонстрируют согласие рассчитанных и экспериментальных значений величины магнитного момента ( $M_0$ )

в пределах нескольких процентов<sup>7</sup>. Использование теоремы «локальных сил» Андерсена для магнитных возбуждений<sup>5, 6</sup> позволяет, в принципе, столь же строго рассчитывать их характеристики, например константу спин-волновой жесткости ( $D$ ), параметры эффективного межатомного обменного взаимодействия ( $J_{ij}$ ). Хотя обменное взаимодействие в металлических системах является существенно негейзенберговским, параметрам  $J_{ij}$  может быть придан строгий смысл для описания энергии слабо неоднородных распределений спиновой плотности. Другой важной характеристикой является параметр молекулярного поля

$$J_i = \sum_{j \neq i} J_{ij},$$

описывающий взаимодействие магнитного момента на узле  $i$  со всем кристаллом.

Современные вычислительные методы позволяют не только исследовать особенности энергетического спектра твердых тел, но и определять параметры обменной связи. Наиболее удобной схемой расчета магнитных взаимодействий является формализм многократного рассеяния — методы ККР или ЛМТО-функции Грина. В этих подходах вся информация об электронной структуре кристалла содержится в полной матрице рассеяния  $T_{ij}$ , зависящей от спиновых ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) и орбитальных ( $L = l, m$ ) переменных, а также энергии  $E$ . Согласно<sup>5, 6</sup> все характеристики магнитных возбуждений при температуре  $T = 0$  выражаются через  $T_{ij}$  в основном состоянии, например

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{E_F} \text{Im Sp}_L (\Delta_i T_{ij}^\dagger \Delta_j T_{ji}^\dagger) dE,$$

$$J_0 = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{E_F} \text{Im Sp}_L [\Delta_0 (T_{00}^\dagger - T_{00}^\dagger) + \Delta_0 T_{00}^\dagger \Delta_0 T_{00}^\dagger] dE,$$

где  $\Delta_i = t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1}$ ,  $t_i$  — одноузловая матрица рассеяния. При обобщении метода<sup>5,6</sup> на релятивистский случай были получены выражения для констант магнитной анизотропии и параметров антисимметричного взаимодействия Дзялошинского — Мории. В приближении среднего поля  $J_0$  определяет температуру Кюри  $T_c$ <sup>5</sup>. Расчет  $J_0$  для примеси в магнитной матрице позволяет оценить устойчивость параллельной или антипараллельной ориентации примесного спина. Развитие аналогичной методики для парамагнитного состояния в рамках ККР-приближения когерентного потенциала позволяет рассчитать магнитную восприимчивость<sup>4</sup>, а также концентрационную зависимость  $T_c$  в сплавах<sup>6</sup>.

Выполненные расчеты магнитных свойств большого числа переходных металлов, их сплавов и соединений продемонстрировали возможности неэмпирического подхода в теории зонного магнетизма. Полученные значения константы спиновой жесткости  $D$  для Fe и Ni (294 и 386 мэВ·А<sup>2</sup>) хорошо согласуются с экспериментальными данными (314 и 395 мэВ·А<sup>2</sup>). Во всех исследованных системах параметр  $J_0$  объясняет наблюдаемый тип магнитного

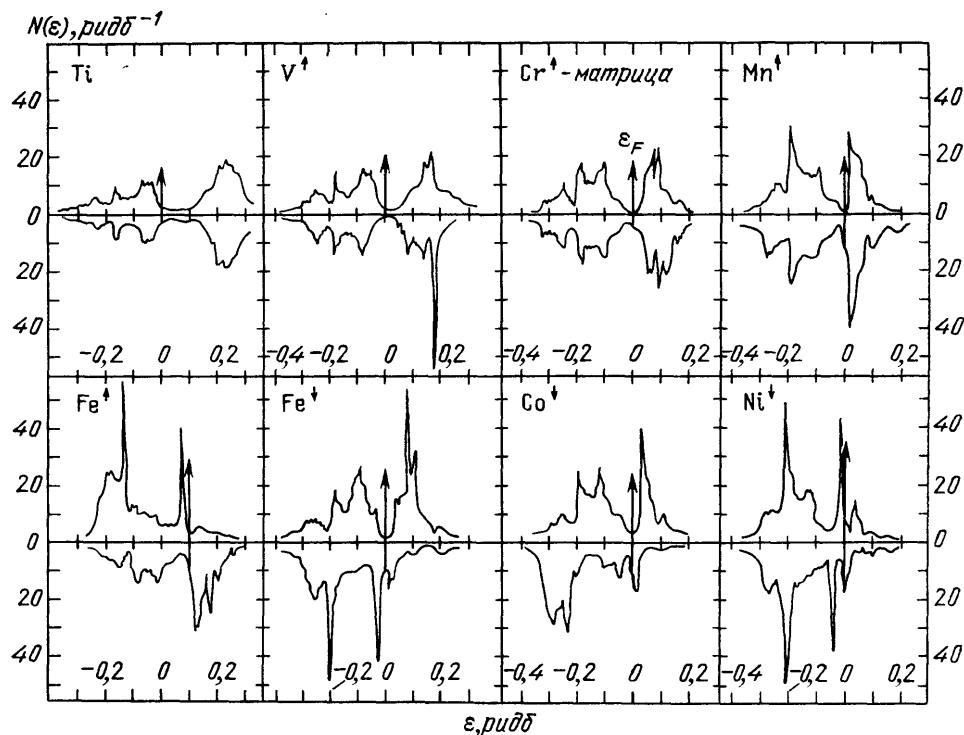


Рис. 2. Локальные плотности электронных состояний примесей переходных металлов в антиферромагнитном хроме

упорядочения (например, ферромагнитное в  $\text{FePd}_3$ ,  $\text{MnPt}_3$  и антиферромагнитное в  $\text{FePt}_3$ ,  $\text{MnPd}_3$ ). Изучение зависимости  $J_0(E_F)$  для идеальных кристаллов и примесей, позволяет объяснить механизмы формирования магнитных свойств в ряду переходных металлов, в частности, тенденцию к антиферромагнетизму при заполнении зоны близком к половинному и ферромагнетизму при большем заполнении (рис. 1). Негейзенберговский характер обменных взаимодействий в металлах наиболее ярко проявляется в существовании двух магнитных решений ( $M_0 > 0$  и  $M_0 < 0$ ) устойчивых относительно поворота момента ( $J_0 > 0$  в обоих состояниях). Такая ситуация имеет место для примеси Mn в Fe и отражает экспериментальные данные о разбавленных сплавах  $\text{FeMn}$ <sup>8</sup>, а также для примеси Fe в антиферромагнитном Cr (рис. 2). Отметим наличие резких примесных пиков плотности элек-

тронных состояний вблизи  $E_F$  для обоих магнитных состояний примеси Fe в антиферромагнитной «псевдошели» Cr, которые могут являться причиной аномальных свойств разбавленных сплавов CrFe<sup>9</sup>.

Для более детального исследования вопроса о степени локализации магнитного момента и зависимости «константы» обменного взаимодействия  $J_0$  от магнитной конфигурации были выполнены расчеты возбужденного состояния «примеси» с моментом  $M_0$ , повернутым на угол  $\theta$ . Для полностью локализованного момента  $M_0$  не зависит от  $\theta$ , а энергия поворота  $\delta E \sim 1 - \cos \theta$ . Расчеты для Fe показывают, что такая картина справедлива для  $\theta \leq 45^\circ$ , затем  $M_0(\theta)$  начинает уменьшаться, а при  $\theta \geq 135^\circ$  самосогласованное решение исчезает. В случае примеси Mn в Fe  $M_0$  слабо зависит от  $\theta$  во всем интервале  $0 \leq \theta \leq 180^\circ$ , что говорит о более сильной локализации магнитного момента, при этом  $\delta E$  имеет существенно негейзенберговский вид. Примером обратной ситуации плохо определенного локального момента может служить чистый Ni, в котором  $M_0(\theta)$  резко падает уже при малых  $\theta$ .

Таким образом, основываясь на исследовании конкретных особенностей электронной зонной структуры, можно успешно определять магнитные характеристики кристаллов. Именно эти подходы позволяют перейти к микроскопическому моделированию свойств новых магнитных сплавов с различной степенью локализации электронных состояний.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вонсовский С. В. Магнетизм. — М.: Наука, 1971.
2. Мория Т. // УФН. 1981. Т. 135. С. 117.
3. Oguchi T., Terakura K., Hamada H. // J. Phys. Ser. F. 1983. V. 13. P. 145.
4. Gyorffy B. L., Pindor A. J., Staunton J., Stocks G. M., Winter H. // Ibidem. 1985. V. 15. P. 1337.
5. Liechtenstein A. I., Katsnelson M. I., Gubanov V. A. // Ibidem. 1984. V. 14. P. L125; Sol. State Commun. 1985. V. 54. P. 327.
6. Liechtenstein A. I., Katsnelson M. I., Antropov V. P., Gubanov V. A. // J. Magn. and Magn. Mater. 1986. V. 54—57. P. 965; 1987. V. 67. P. 65.
7. Dederichs P. H., Zeller R., Akai H., Blügel S., Oswald A. // Phil. Mag. Ser. B. 1985. V. 51. P. 137.
8. March N. H., Lambin P., Herman F. // J. Magn. and Magn. Mater. 1984. V. 44. P. 1.
9. Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // УФН. 1987. Т. 154. С. 523.

524.352(048)

**Н. Н. Чугай.** Сверхновая в Большом Магеллановом Облаке: первый год наблюдения. Сверхновая 1987А, взорвавшаяся 23 февраля 1987 г. в Большом Магеллановом Облаке (БМО), дает уникальную возможность ответить на многие нерешенные вопросы физики сверхновых. Впервые хорошо известна сама звезда до взрыва. Это голубой сверхгигант под номером —69 202 из каталога Сандулека. Отсутствие его признаков в ультрафиолетовом спектре SN1987А по данным спутников «Астрон»<sup>1</sup> и IUE не оставляет сомнений в том, что взорвалась именно эта звезда. По наблюдаемым фотометрическим характеристикам, полученным на основе фотографий в разных цветах, светимость звезды до взрыва составляла  $10^5$  солнечных, температура  $(12-20) \cdot 10^3$  К, радиус — 30 — 60 солнечных. Почти за сто лет наблюдений за БМО звезда не показала никаких признаков переменности. Анализ вспышки радиоизлучения SN1987А, наблюдавшегося в течение 10 дней после взрыва<sup>2</sup>, приводит к оценке темпа потери массы предсверхновой  $10^{-6} - 10^{-5} M_\odot/\text{год}$ . Вероятно, за  $10^4$  лет до взрыва звезда была красным сверхгигантом и теряла вещество с более высоким темпом. Это вещество, обнаруженное по узким ультрафиолетовым линиям в спектре SN1987А в конце мая 1987 года, имеет повышенное на порядок величины содержание азота (С. Fransson, частное сообщение).