

ФЕРРОМАГНЕТИЗМ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

Р. О. Зайцев*

Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Ю. В. Михайлова

Государственный научный центр «НИИТеплоприбор»
129085, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 ноября 1998 г.

На основе представления о сильном взаимодействии в одной и той же элементарной ячейке установлена возможность существования ферромагнитной неустойчивости в системе с перескоками с катионов переходных элементов на анионы непереходных элементов и наоборот. Построена фазовая диаграмма существования ферромагнитного упорядочения в зависимости от степеней заполнения n_p и n_d соответственно для p^6 - и d^{10} -оболочек непереходного и переходного элементов.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

В настоящей работе изучаются электронные свойства простейших металлических бинарных соединений со структурой типа CsCl (см. ниже рис. 1).

Магнитные свойства исследуются на основе обобщенной модели Хаббарда, в которой в качестве нулевого приближения используются состояния отдельных ионов, определяемых по правилу Хунда.

Энергия взаимодействия электронов в одном и том же атоме (так называемая энергия Хаббарда) считается наибольшей энергетической величиной и с самого начала считается равной бесконечности.

В металлической фазе дальнедействующая часть кулоновского и обменного взаимодействий существенно заэкранирована, так что ниже учитывается только взаимодействие между ближайшими соседями, обусловленное перекрытием волновых функций:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} V^{\alpha, k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \{ \hat{e}_{\alpha, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{p}_{k, \sigma}(\mathbf{r}') + \text{H.c.} \} + \sum_{\mathbf{r}, \sigma} (\epsilon_e - \sigma H) \hat{e}_{\alpha, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{e}_{\alpha, \sigma}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}, \sigma} (\epsilon_p - \sigma H) \hat{p}_{k, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{p}_{k, \sigma}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь индексы α пробегает два значения, которые соответствуют двум вырожденным состояниям, $\sqrt{3}(x^2 - y^2)$ и $3z^2 - r^2$, e_g -электронов переходного катиона; индексы k пробегает три значения, что соответствует трем вырожденным состояниям, $a - p_x$, $b = p_y$, $c = p_z$, p -электронов непереходного аниона.

*E-mail: zaitsev@mbslab.kiae.ru; zam@niitp.mainet.msk.su

Энергетическая разность $\tau = \epsilon_p - \epsilon_e$ считается заданным параметром, в то время как сумма одночастичных энергий выражается через химический потенциал $\mu = -(\epsilon_p + \epsilon_e)/2$.

После перехода к фурье-представлению матрица интегралов перекрытия $\hat{V}^{\alpha,k}(\mathbf{q})$ легко вычисляется для заданной кристаллической структуры (см., например, [1]).

При заданном расположении низших состояний атомных мультиплетов коллективизация переходов между N - и $(N + 1)$ -состояниями определяется полюсами одночастичной функции Грина. Для ее вычисления запишем разложение операторов рождения и уничтожения по всевозможным переходам между состояниями низших мультиплетов:

$$\hat{e}_{\alpha,\sigma}^+(\mathbf{r}) = \sum_{\beta} g_{\beta}(\alpha, \sigma) \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\beta}, \quad \hat{p}_{k,\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} g_{\nu}(k, \sigma) \hat{Y}_{\mathbf{r}}^{\nu} \quad (2)$$

Здесь β и ν — номера одночастичных e - или p -переходов; g_{β} и g_{ν} — так называемые генеалогические коэффициенты, которые находим для каждого конкретного типа перехода.

В конечном счете необходимо вычислить средние числа заполнения каждой компоненты мультиплета в зависимости от величины приложенного магнитного поля H .

Ниже используется нуль-петлевое приближение или приближение Хаббард I [2], когда каждая собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина заменяется так называемым конечным множителем f_{β} или f_{ν} равным сумме чисел заполнения начального и конечного состояний, отвечающих заданному переходу β или ν .

В используемом приближении [3] полная функция Грина $\hat{D}_{\omega}(\mathbf{q})$ есть произведение виртуальной функции Грина $G_{\omega}^{\alpha,\nu}(\mathbf{q})$ на конечный множитель f_{ν} . Сама же виртуальная функция Грина удовлетворяет уравнению типа Дайсона:

$$D_{\omega}^{\alpha,\nu}(\mathbf{q}) = G_{\omega}^{\alpha,\nu}(\mathbf{q}) f_{\nu}, \quad \hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{q}) = \left(\hat{G}_{\omega}^{(0)} \right)^{-1} - \hat{W}. \quad (3)$$

Элементы матрицы \hat{W} определяются через генеалогические коэффициенты разложения (2) операторов рождения и уничтожения после их подстановки в гамильтониан (1):

$$W_{\beta,\nu}(\mathbf{q}) = f_{\beta} \sum_{\alpha,k} g_{\beta}(\alpha) \sum_k V^{\alpha,k}(\mathbf{q}) g_{\nu}(k). \quad (4)$$

Всевозможные $N + 1$ -частичные числа заполнения, которые отвечают переходу $\alpha (N_k, (N + 1)_s)$, при заданной температуре T и химическом потенциале вычисляются через диагональные матричные элементы одночастичной функции Грина с помощью следующей общей формулы:

$$n_{(N+1)}(s) = T \sum_{\omega,\mathbf{q}} \exp(i\omega\delta) D_{\omega}^{\alpha,-\alpha}(\mathbf{q}). \quad (5)$$

Здесь δ — положительная бесконечно малая величина, $\omega = (2n + 1)\pi T$, а символ $-\alpha$ обозначает номер перехода обратного по отношению к α .

Правая сторона формулы (5) может быть определена с помощью формул (3), (4) через конечные множители, входящие в матричные элементы прямой и обратной функций Грина.

Средние числа заполнения удастся выразить через конечные множители, так что в используемом приближении удастся получить замкнутую систему уравнений для вариаций всех конечных множителей в зависимости от приложенного магнитного поля.

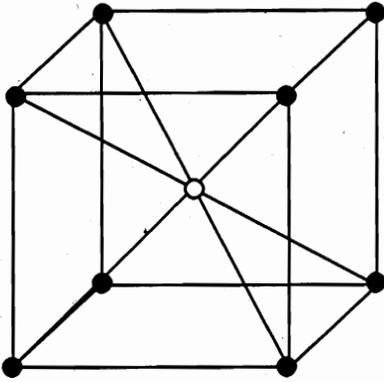


Рис. 1. Кубическая решетка типа CsCl

В конечном счете удастся получить уравнения для нахождения магнитной проницаемости в зависимости от температуры и среднего числа n_e - и n_p -электронов, приходящихся на одну элементарную ячейку.

Ферромагнитная неустойчивость определяется из условия появления бесконечной спиновой магнитной восприимчивости.

Предлагаемый метод позволяет объяснить ферромагнетизм соединений типа FeAl с температурой Кюри $T_c = 623$ К, $n^* \approx 1\mu_B$ и MnSi с температурой Кюри $T_c = 34$ К, $n^* \approx 0.4\mu_B$. Если предположить, что t_{2g} -оболочка переходного элемента и $3s$ -оболочка неперегородного элемента полностью заполнены, тогда суммарное число $n_e + n_p = 3 - n_s$, где n_s — среднее число $4s$ -электронов переходного элемента, которое мы будем считать произвольным параметром.

По этой причине ниже подробно рассматривается одновременное заполнение e_g - и $3p$ -оболочек для каждого целочисленного интервала изменения переменных n_p и n_e .

Матрица интегралов перехода между ближайшими ионами пропорциональна интегралу перекрытия $(16/\sqrt{3})\tau(111)_{x,x^2-y^2}$, который ниже считается равным единице. Остальные матричные элементы вычисляются в согласии с ОЦК-структурой элементарной ячейки, изображенной на рис. 1:

$$\hat{V}^{\alpha,k}(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{3}(x^2 - y^2)}{3z^2 - r^2} \begin{pmatrix} p_x & p_y & p_z \\ \sqrt{3}\nu_x^- \nu_y^+ \nu_z^+ & -\sqrt{3}\nu_x^+ \nu_y^- \nu_z^+ & 0 \\ -\nu_x^- \nu_y^+ \nu_z^+ & -\nu_x^+ \nu_y^- \nu_z^+ & 2\nu_x^+ \nu_y^+ \nu_z^- \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где матричные элементы зависят от квазиимпульсов $q_{x,y,z}$ через функции $\nu_k^\pm = 1 \pm \exp(iq_k)$.

2. РАСЧЕТ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ

Область малых концентраций, $n_{p,e} < 1$

В предельном случае бесконечной энергии Хаббарда операторы рождения и уничтожения удобно выразить через \hat{X} — операторы перехода между пустыми $|0\rangle$ и одночастичными $|\sigma, \lambda\rangle$ состояниями. При этом мы пренебрегаем переходами на двух- и трехчастичные состояния:

$$\hat{e}_{r\sigma,\eta} = \hat{X}_r^{(0|\sigma,\eta)}, \quad \hat{e}_{r\sigma,\eta}^+ = \hat{X}_r^{(\sigma,\eta|0)}, \quad \hat{p}_{r\sigma,\nu} = \hat{Y}_r^{(0|\sigma,\nu)}, \quad \hat{p}_{r\sigma,\nu}^+ = \hat{Y}_r^{(\sigma,\nu|0)}. \quad (7)$$

После подстановки этого разложения в исходный гамильтониан (1), мы получаем явное выражение для обратной функции Грина:

$$\hat{G}_\omega^{-1}(\mathbf{q}) = \begin{matrix} & e_\beta & p_s \\ \begin{matrix} e_\alpha \\ p_k \end{matrix} & \begin{pmatrix} (i\omega - \epsilon_e)\delta_{\alpha,\beta} & -f_\alpha V^{\alpha,k}(\mathbf{q}) \\ -f_p V^{k,\beta}(\mathbf{q}) & (i\omega - \epsilon_p)\delta_{k,s} \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (8)$$

Здесь $\epsilon_{p,e}$ — энергии одночастичных p -, e -состояний; $f_{p,e}$ — концевые множители, равные сумме чисел заполнения начального и конечного состояний; $V^{\alpha,s}(\mathbf{q})$ — матрица энергий перехода (6), $V^{k,\beta}(\mathbf{q})$ — эрмитово-сопряженная матрица.

Для нахождения средних чисел заполнения $n_{p,e}^{(\sigma)}$ используем простейшее приближение [2], где энергия возбуждений определяется усредненной собственнo-энергетической частью, которая выражается через так называемые концевые множители, которые в данном случае равны сумме среднего числа пустых и одночастичных состояний

$$f_{p,k}^{(\sigma)} = n_0 + n_{I,k}^{(\sigma)}, \quad f_{e,\alpha}^{(\sigma)} = n_0 + n_{I,\alpha}^{(\sigma)} \quad (9)$$

С учетом независимости от номера одночастичного состояния k или α получаем следующие уравнения состояния:

$$n_e^{(\sigma)} = \sum_\alpha n_{I,\alpha}^{(\sigma)} = 2f_e^{(\sigma)} \sum_{p\lambda=\pm} a_p^{(-\lambda)} n_F(\xi_p^{(\sigma,\lambda)}), \quad (10)$$

$$n_p^{(\sigma)} = \sum_k n_{I,k}^{(\sigma)} = f_p^{(\sigma)} \left[n_F(\epsilon_p) + 2 \sum_{p\lambda=\pm} a_p^{(\lambda)} n_F(\xi_p^{(\sigma,\lambda)}) \right] \quad (10')$$

Здесь $n_F(\epsilon)$ — распределение Ферми и две дважды вырожденные ветви спектра:

$$\xi_p^{(\sigma,\pm)} = \pm \sqrt{\left(\frac{r}{2}\right)^2 + f_p^{(\sigma)} f_e^{(\sigma)} t_p^2} - \sigma H - \mu, \quad a_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{r}{\xi_p^{(\sigma,+)} - \xi_p^{(\sigma,-)}} \right], \quad (11)$$

где

$$t_p^2 = s_x^2 c_y^2 c_z^2 + s_y^2 c_x^2 c_z^2 + s_z^2 c_x^2 c_y^2, \quad s_k^2 = 4 \sin^2(pk/2), \quad c_k^2 = 4 \cos^2(pk/2).$$

Уравнения состояния (10) представляются через интегралы от единственной переменной t_p^2 , так что имеет смысл ввести функцию плотности состояний,

$$\rho(\epsilon) = \sum_{p_x, p_y, p_z} \delta(\epsilon - t_p^2),$$

через которую выражаются все суммы по импульсам.

С учетом кубической симметрии концевые множители (9) выражаются через средние числа заполнения одночастичных состояний

$$n_{p,e}^{(\sigma)} = \sum_{s=1}^{3,2} n_s^{(\sigma)}.$$

Так как

$$n_0 + \sum_{s,\sigma} n_s^{(\sigma)} = 1,$$

получим следующее:

$$f_p^{(\sigma)} = 1 - n_p^{(-\sigma)} - \frac{2}{3}n_p^{(\sigma)}, \quad f_d^{(\sigma)} = 1 - n_e^{(-\sigma)} - \frac{1}{2}n_e^{(\sigma)}. \quad (12)$$

Отсюда находим вариации концевых множителей через вариации средних чисел заполнения, которые определяются вариацией внешнего магнитного поля:

$$\delta n_{p,e}^{(\sigma)} = -\delta n_{p,e}^{(-\sigma)}, \quad \delta f_p^{(\sigma)} = \frac{1}{3}\delta n_p^{(\sigma)}, \quad f_e^{(\sigma)} = \frac{1}{2}\delta n_e^{(\sigma)}. \quad (13)$$

Эти соотношения вместе с уравнениями состояния (10) при заданной величине магнитного поля позволяют записать уравнения только для вариации концевых множителей:

$$\begin{aligned} \delta f_e^{(\sigma)} &= [K_e + L_e]\delta f_e^{(\sigma)} + \frac{f_e}{f_p}L_d\delta f_p - f_e R_e \sigma \delta H, \\ \delta f_p^{(\sigma)} &= [K_p + L_p]\delta f_p^{(\sigma)} + \frac{f_p}{f_e}L_p\delta f_e - f_p R_p \sigma \delta H. \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда находим магнитную восприимчивость:

$$\chi = \frac{\delta n_e^{(\sigma)}}{\delta H} + \frac{\delta n_p^{(\sigma)}}{\delta H} = 2\frac{\delta f_e^{(\sigma)}}{\delta H} + 3\frac{\delta f_p^{(\sigma)}}{\delta H}. \quad (15)$$

Возможность появления ферромагнитной неустойчивости получаем как условие возникновения сингулярности магнитной восприимчивости:

$$\det \begin{pmatrix} 1 - (K_e + L_e), & -f_e L_e / f_p \\ -f_p L_p / f_e, & 1 - (K_p + L_p) \end{pmatrix} = 0. \quad (16)$$

Здесь введены следующие функции:

$$K_e = \sum_{p,\lambda=\pm} a_p^{(-\lambda)} n_F(\xi_p^{(\lambda)}) = \frac{n_e}{4 - 3n_e}, \quad \xi_p^{(\pm)} = \pm \sqrt{(r/2)^2 + f_e f_p t_p^2} - \mu, \quad (17)$$

$$K_p = \frac{1}{3} \left[n_F(\epsilon_p) + 2 \sum_{p,\lambda=\pm} a_p^{(\lambda)} n_F(\xi_p^{(\lambda)}) \right] = \frac{n_p}{6 - 5n_p}. \quad (18)$$

Все функции зависят от единственной величины $f_p f_e t_p^2$, которая инвариантна относительно преобразования кубической симметрии (определена в (5)).

Коэффициенты $L_{p,e}$, входящие в уравнения для определения границы ферромагнитного упорядочения, определяются через производные от правой части уравнений состояния:

$$L_{p,e} = b \frac{\partial K_{p,e}}{\partial b}, \quad \text{где } b = g_p^2 g_e^2 f_p f_e t^2. \quad (19)$$

В данном случае коэффициенты $g_{p,e}^2 = 1$,

$$f_e = \frac{4 - 3n_e}{4}, \quad f_p = \frac{6 - 5n_p}{6}. \quad (20)$$

В рассматриваемой области электронные состояния резонируют между пустыми и одночастичными состояниями. Поэтому для малого числа возбуждений ферромагнитное состояние не возникает [3], однако система имеет увеличенное значение магнитной восприимчивости.

Область концентраций $n_p < 1, 1 < n_e < 2$

Рассмотрим ситуацию, когда e_g -электроны резонируют между одно- и двухчастичными состояниями, в то время как число p -электронов по-прежнему меньше единицы ($n_p < 1$).

Одночастичные состояния $\hat{e}_{1,\sigma}^+|0\rangle, \hat{e}_{2,\sigma}^+|0\rangle$ имеют спин $1/2$. Низшие по энергии двухчастичные состояния 3A_2 имеют спин $S = 1$:

$$\hat{e}_{1,\sigma}^+ \hat{e}_{2,\sigma}^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{e}_{1,\uparrow}^+ \hat{e}_{2,\downarrow}^+ + \hat{e}_{1,\downarrow}^+ \hat{e}_{2,\uparrow}^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0). \quad (21)$$

Более высокие по энергии состояния 1E и 1A_1 не учитываются.

При конечном значении внешнего магнитного поля вариации концевых множителей зависят от вариации как одночастичных (n_i), так и двухчастичных (n_{II}) чисел заполнения. Учитывая симметрию системы относительно перестановки состояний $e_2 = 3z^2 - r^2$ и $e_1 = \sqrt{3}(x^2 - y^2)$, находим вариации концевых множителей:

$$\begin{aligned} f_1^{(\sigma)} &= n_{II}^{(\sigma)} + n_1^{(\sigma)}, & \delta f_1^{(\sigma)} &= \delta n_{II}^{(\sigma)} + \delta n_1^{(\sigma)}, \\ f_2^{(\sigma)} &= n_{II}^{(0)} + n_1^{(-\sigma)}, & \delta f_2^{(\sigma)} &= \delta n_1^{(-\sigma)} = -\delta n_1^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (22)$$

Таким образом, в отличие от предыдущего «одночастичного» случая необходимо иметь два независимых уравнения для нахождения вариаций одночастичных и двухчастичных e -состояний.

Для получения этих уравнений умножим существенную часть разложения оператора уничтожения

$$\hat{e}_{r\sigma} = g_1 \hat{X}_r^{(0,\sigma|\sigma,\sigma)} + g_2 \hat{X}_r^{(0,-\sigma|\sigma,-\sigma)}, \quad (23)$$

где $g_1 = 1, g_2 = 1/\sqrt{2}$, на произвольную линейную комбинацию сопряженных X -операторов:

$$\hat{Y}_r = \beta_1 \hat{X}_r^{(\sigma,\sigma|0,\sigma)} + \beta_2 \hat{X}_r^{(\sigma,-\sigma|0,-\sigma)}.$$

Усредняя отдельные T -произведения по состояниям с данной температурой и химическим потенциалом, находим соотношение, связывающее двухчастичные числа заполнения n_{II} , компоненты Фурье виртуальной одночастичной функции Грина $\hat{G}_\omega(p)$ и концевые множители $f_k(\sigma)$, где $k = 1, 2$, а также $f_p(\sigma)$.

Проведем вычисление T -произведений в рамках нуль-петлевого приближения Хаббард I:

$$\begin{aligned}
 -\langle \hat{T}(\hat{e}_{r,\sigma}(\tau), \hat{Y}_r(\tau + 0)) \rangle &= (g_1 \gamma_1) \langle X^{(S_z = \sigma | S_z = \sigma)} \rangle + (g_2 \gamma_2) \langle X^{(S_z = 0 | S_z = 0)} \rangle = \\
 &= (g_1 \gamma_1) n_{II}^{(\sigma)} + (g_2 \gamma_2) n_{II}^{(0)} = T \sum_{\omega, \mathbf{p}; \alpha, \beta} g_\alpha G_\omega^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) \gamma_\beta f_\beta \exp(i\omega\delta). \quad (24)
 \end{aligned}$$

Здесь $\delta = 0+$ есть малая положительная добавка, f_s — концевые множители (22).

Матричные элементы одночастичной функции Грина выражаются через обратную матрицу, где теперь каждая строка и столбец, отвечающие e -состояниям, имеют удвоенное число компонент. Соответствующие матричные элементы определяются через генеалогические коэффициенты g_α , входящие в разложение (23). Так, для выделенного оператора $\hat{e}_{1\sigma}$ две первых строки обратной функции Грина могут быть записаны следующим образом:

$$\hat{G}_\omega^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{matrix} & \beta = 1 & \beta = 2 & s = 3, 4 \\ \begin{matrix} ((0, \sigma) \rightarrow (\sigma, \sigma)); \alpha = 1 \\ ((0, -\sigma) \rightarrow (\sigma, -\sigma)); \alpha = 2 \\ k = 3, 4 \dots \end{matrix} & \begin{pmatrix} i\omega - \epsilon_e & 0 & -f_1 g_1 \rho_s^p \\ 0 & i\omega - \epsilon_e & -f_2 g_2 \rho_s^p \\ -\nu_p^k g_1 & -\nu_p^k g_2 & \tau_{k,s} \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (25)$$

Здесь $g_1 = 1$, $g_2 = 1/\sqrt{2}$, а концевые множители определены в (22).

Используя явный вид матричных элементов обратной матрицы, удастся вычислить суммы, входящие в правую сторону соотношения (25). Если заметить, что энергии переходов, сопровождающихся рождением одного и того же e_1 -состояния, одинаковы, тогда получим

$$\sum_{\alpha=1,2} g_\alpha G_\omega^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) = g_\beta (i\omega - \epsilon_e) \frac{\det \tau_{k,s}}{\det G^{-1}}, \quad (26)$$

Проводя суммирование обеих сторон этого соотношения по импульсам и частотам, находим результат, пропорциональный значениям генеалогических коэффициентов g_β :

$$T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \sum_{\alpha=1,2} g_\alpha G_\omega^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) = g_\beta K_e(H).$$

В результате имеем соотношение при произвольных γ_α :

$$g_1 \gamma_1 n_{II}^{(S_z = \sigma)} + g_2 \gamma_2 n_{II}^{(S_z = 0)} = K_e(H) \sum_{\beta=1,2} g_\beta \gamma_\beta f_\beta. \quad (27)$$

В результате варьирования уравнения (27) по величине магнитного поля получаем два уравнения.

При условии

$$\sum_{1 \leq \alpha \leq 2} g_\alpha \gamma_\alpha = 0$$

находим уравнение, не зависящее от величины приложенного внешнего поля.

$$\delta n_{II}^{(\sigma)}(1 - K_e) - 2K_e \delta n_I^{(\sigma)} = \delta f_1^{(\sigma)}(1 - K_e) + \delta f_2^{(\sigma)}(1 + K_e) = 0. \quad (28)$$

Здесь электронная плотность заключена в интервале $1 < n_e < 2$, а коэффициенты вычисляются при нулевом внешнем магнитном поле:

$$K_e = \sum_{p, \lambda = \pm} a_p^{(-\lambda)} n_{F(\xi_p^{(\lambda)})} = 2 \frac{n_e - 1}{2 + n_e}, \quad \xi_p^{(\pm)} = \pm \sqrt{\left(\frac{r}{2}\right)^2 + g_e^2 f_e f_p t_p^2} - \mu, \quad (29)$$

$$f_e = \frac{2 + n_e}{12}, \quad f_p = \frac{6 - 5n_p}{6}, \quad g_e^2 = g_1^2 + g_2^2 = \frac{3}{2}. \quad (30)$$

При условии $g_\alpha = \gamma_\alpha$ получаем уравнение для восприимчивости:

$$\delta n_{II}^{(\sigma)} = \delta f_2^{(\sigma)} + \delta f_1^{(\sigma)} = [K_e + L_e] \sum_{\alpha=1,2} g_\alpha^2 \delta f_\alpha^{(\sigma)} + g_e^2 \frac{f_e}{f_p} L_e \delta f_p - g_e^2 f_e R_e \sigma \delta H, \quad (31)$$

где коэффициент L_e определяется следующей общей формулой:

$$L_e = b \frac{\partial}{\partial b} K_e = \sum_{p, \lambda = \pm} t_p^2 \frac{\delta}{\delta t_p^2} [n_{F(\xi_p^{(\lambda)})} a_p^{(-\lambda)}],$$

$$R_e = \sum_{p, \kappa = \pm} a_p^{(-\kappa)} n'_{F(\xi_p^{(\kappa)})}, \quad a_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{r}{\sqrt{r^2 + 4g_e^2 f_e f_p t_p^2}} \right]. \quad (32)$$

Уравнение для определения вариации одночастичных p -состояний находим из уравнения для чисел заполнения n_p вполне аналогичного (10):

$$n_p^{(\sigma)} = f_p^{(\sigma)} \left[n_{F(\epsilon_p)} + 2 \sum_{p\kappa = \pm} a_p^{(\kappa)} n_{F(\xi_p^{(\sigma, \kappa)})} \right]. \quad (33)$$

Связь между вариацией чисел заполнения и вариацией конечных множителей $f_p^{(\sigma)}$ находим с помощью общего соотношения (14):

$$\delta f_p^{(\sigma)} = L_p \frac{f_p}{g_e^2 f_e} \sum_{\alpha=1,2} g_\alpha^2 \delta f_\alpha^{(\sigma)} + [K_p + L_p] \delta f_p - f_p R_p \sigma \delta H. \quad (34)$$

Коэффициенты K_p и L_p вычислены согласно соотношениям (18), (19) где энергия возбуждений ξ_p^\pm определяется согласно (29).

Таким образом, система из трех уравнений (28), (31) и (34) определяет изменения трех конечных множителей, через которые выражаются вариации всех чисел заполнения.

Условие разрешимости соответствующей однородной системы уравнений определяет возможность появления ферромагнитной неустойчивости. В результате, условие фазового перехода в ферромагнитное состояние имеет следующий простой вид:

$$(1 - K_p) [K_e(1 - K_e) - L_e(1/3 + K_e)] - L_p K_e(1 - K_e) = 0. \quad (35)$$

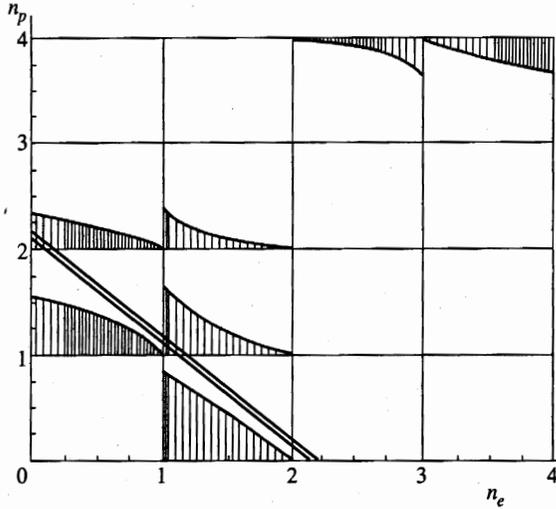


Рис. 2. Магнитная фазовая диаграмма при $T = 0$. Ферромагнитные области заштрихованы, прямые линии соответствуют уравнениям электронейтральности: верхняя — MnSi, нижняя — FeAl

Здесь

$$K_e = 4 \frac{(n_e - 1)}{2 + n_e}, \quad K_p = \frac{n_p}{6 - 5n_p}, \quad n_e = \frac{2K_e + 4}{4 - K_e}, \quad n_p = \frac{6K_p}{1 + 5K_p}. \quad (36)$$

Это уравнение устанавливает связь между энергетическими величинами ϵ_p и ϵ_e . Исключая их с помощью уравнений состояния (12) и (17) в нулевом поле, получим магнитную фазовую диаграмму в переменных n_e и n_p (см. рис. 2).

Область концентраций $n_e < 1, 1 < n_p < 2$

Рассмотрим ситуацию, когда состояния $p_x = a, p_y = b, p_z = c$ резонируют между одно- и двухчастичными состояниями, в то время как число d -электронов на e_g -оболочке остается меньше единицы ($n_p < 1$).

Одночастичные состояния $\hat{a}_\sigma^+|0\rangle, \hat{b}_\sigma^+|0\rangle, \hat{c}_\sigma^+|0\rangle$ имеют спин $1/2$. Низшие по энергии двухчастичные состояния 3A_2 имеют спин $S = 1$:

$$\hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{a}_\uparrow^+ \hat{b}_\downarrow^+ + \hat{a}_\downarrow^+ \hat{b}_\uparrow^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0). \quad (37)$$

Шесть остальных двухчастичных состояний находим с помощью циклического преобразования $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow a$.

Более высокие по энергии состояния 1E и 1A_1 не учитываются.

При конечном значении внешнего магнитного поля вариации конечных множителей зависят от вариации как одночастичных (n_i), так и двухчастичных (n_{II}) чисел заполнения. Учитывая симметрию системы относительно перестановки a -, b -, c -состояний, находим вариации конечных множителей:

$$f_1^{(\sigma)} = n_{II}^{(\sigma)} + n_I^{(\sigma)}, \quad \delta f_1^{(\sigma)} = \delta n_{II}^{(\sigma)} + \delta n_I^{(\sigma)}, \quad f_2^{(\sigma)} = n_{II}^{(0)} + n_I^{(\sigma)}, \quad \delta f_2^{(\sigma)} = \delta n_I^{(\sigma)} = -\delta n_I^{(\sigma)}, \quad (38)$$

которые фактически совпадают с вариациями двухчастичных и одночастичных d -состояний.

Отсюда сразу заключаем, что общие уравнения (28), не зависящие от вариации магнитного поля, остаются неизменными:

$$\delta n_{II}^{(\sigma)}(1 - K_p) - 2K_p \delta n_I^{(\sigma)} = \delta f_1^{(\sigma)}(1 - K_p) + \delta f_2^{(\sigma)}(1 + K_p) = 0. \quad (39)$$

Уравнение для восприимчивости, записанное через вариации концевых множителей, и слева и справа содержит удвоенное число слагаемых. Поэтому окончательное уравнение содержит лишний множитель $1/2$ перед вариацией одночастичных e -состояний δf_e :

$$\delta n_{II}^{(\sigma)} = \delta f_2^{(\sigma)} + \delta f_1^{(\sigma)} = [K_p + L_p] \sum_{k=1,2} g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + g_p^2 \frac{f_p}{2f_e} L_p \delta f_e - g_p^2 f_p R_p \sigma \delta H. \quad (40)$$

Различие возникает только при подсчете числа одинаковых переходов, которых в два раза больше. Сумма квадратов генеалогических коэффициентов также удваивается: $g_p^2 = 3$.

По аналогии с (14) находим уравнение для вариации f_e с удвоенной величиной коэффициента при вариациях $\delta f_{1,2}$:

$$\delta f_e^{(\sigma)} = [K_e + L_e] \delta f_e^{(\sigma)} + 2 \frac{f_e}{g_p^2 f_p} L_d \sum_{k=1,2} g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} - f_e R_e \sigma \delta H. \quad (41)$$

Здесь все коэффициенты определяются при $H = 0$ по тем же формулам, но с другими уравнениями для K_p и K_e . При этом

$$K_p = 2 \frac{n_p - 1}{4 - n_p}, \quad K_e = \frac{n_e}{(4 - 3n_e)}, \quad n_p = 2 \frac{(2K_p + 1)}{(2 + K_p)}, \quad n_e = \frac{4K_e}{(1 + 3K_e)}. \quad (42)$$

Условие ферромагнитной неустойчивости имеет тот же вид (35), но с переставленными индексами $p \leftrightarrow e$:

$$(1 - K_e) [K_p(1 - K_p) - L_p(1/3 + K_p)] - L_e K_p(1 - K_p) = 0 \quad \text{для } n_e < 1, \quad 1 < n_p < 2. \quad (43)$$

Общее свойство уравнений (36) и (43), которое отличает их от уравнения (16), состоит в появлении множителя K_e и, соответственно, K_p , что отвечает возможности возникновения ферромагнетизма при малом числе возбуждений при $n_e - 1 \ll 1$ или $n_p - 1 \ll 1$.

Область концентраций $1 < n_p < 2, 1 < n_e < 2$

Уравнения, относящиеся к области $1 < n_{p,e} < 2$, получаем обобщением результатов двух предыдущих разделов.

Уравнения (28), (38) и (39) остаются без изменения.

Два других уравнения находим по аналогии с уравнениями (31) и (40) для двухчастичных чисел заполнения $n_{p,e}^\sigma$:

$$\delta n_{II,e}^{(\sigma)} = \delta f_{2,e}^{(\sigma)} + \delta f_{1,e}^{(\sigma)} =$$

$$= [K_e + L_e] \sum_{\alpha=1,2} g_{\alpha}^2 \delta f_{\alpha,e}^{(\sigma)} + 2g_e^2 \frac{f_e}{g_p^2 f_p} L_e \sum_{k=1,2} g_k^2 \delta f_{k,p}^{\sigma} - g_e^2 f_e R_e \sigma \delta H, \quad (44)$$

$$\delta n_{11,p}^{(\sigma)} = \delta f_{2,p}^{(\sigma)} + \delta f_{1,p}^{(\sigma)} =$$

$$= [K_p + L_p] \sum_{k=1,2} g_k^2 \delta f_{k,p}^{(\sigma)} + g_p^2 \frac{f_p}{2g_e^2 f_e} L_p \sum_{\alpha=1,2} \delta g_{\alpha=1,2}^2 f_{\alpha,d}^{\sigma} - g_p^2 f_p R_p \sigma \delta H. \quad (45)$$

Здесь $g_p^2 = 3$, $g_e^2 = 3/2$, $K_e = 4(n_e - 1)/(2 + n_e)$, $K_p = 2(n_p - 1)/(4 - n_p)$.

Уравнение, определяющее границу появления ферромагнитной неустойчивости, имеет вид, симметричный относительно замены $p \leftrightarrow e$:

$$K_p K_e (1 - K_p)(1 - K_e) = L_p K_e (1 - K_e)(1/3 + K_p) + L_e K_p (1 - K_p)(1/3 + K_e). \quad (46)$$

При этом

$$K_p = 2 \frac{n_p - 1}{4 - n_p}, \quad K_e = 4 \frac{(n_e - 1)}{2 + n_e}, \quad n_p = 2 \frac{(2K_p + 1)}{(2 + K_p)}, \quad n_e = 2 \frac{K_e + 2}{4 - K_e}. \quad (47)$$

При положительных $L_{p,e} \approx 1$ и при малом числе возбуждений, $n_{p,e} - 1 \ll 1$, левая сторона (46) оказывается малой по сравнению с правой стороной, что отвечает возможности возникновения ферромагнетизма.

Область концентраций $n_e < 1, 2 < n_p < 3$

Рассмотрим наиболее сложный случай, когда p -электроны резонируют между двух- и трехчастичными состояниями. Будем считать, что $2 < n_p < 3$, в то время как числа заполнения n_e не превышают единицы.

Низшее трехчастичное состояние имеет $S = 3/2$ и четырехкратное вырождение по проекции спина:

$$\hat{a}_{\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad S_z = 3\sigma/2,$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} (\hat{a}_{\bar{\sigma}}^{\dagger} \hat{b}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle + \hat{a}_{\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{\bar{\sigma}}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle + \hat{a}_{\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\bar{\sigma}}^{\dagger} |0\rangle), \quad S_z = \frac{\sigma}{2}. \quad (48)$$

Три низших триплетных состояния со спином 1 построены из трех различных произведений пар операторов рождения (см. определение (21)).

Разложение по X -операторам перехода между двух- и трехчастичными низшими по энергии состояниями определяется тремя генеалогическими коэффициентами ($\hat{a}_{\tau\sigma} = \hat{p}_x$):

$$\hat{a}_{\tau\sigma} = \hat{X}_r^{(0,\sigma,\sigma|3\sigma/2)} + \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_r^{(A(yz,xz)|\sigma/2)} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{X}_r^{(0,\bar{\sigma},\bar{\sigma}|\bar{\sigma}/2)}. \quad (49)$$

Разложение двух других операторов уничтожения $\hat{b} = \hat{p}_y$ и $\hat{c} = \hat{p}_z$ получаем из (49) с помощью операции циклической перестановки.

В отсутствие поля все средние числа заполнения и концевые множители удастся выразить через n_p — среднее число электронов, приходящееся на одну ячейку. С учетом кратности вырождения имеем следующее:

$$3n_{II} + 4n_{III} = 1, \quad 18n_{II} + 12n_{III} = n_p, \quad f_p = \frac{5n_p - 6}{36}. \quad (50)$$

После суммирования по спиновому индексу получим уравнение состояния:

$$n_p = 2 + 4f_p K_p, \quad K_p = \frac{1}{3} \left\{ n_{F(\epsilon_p)} + \sum_{\rho, \lambda = \pm} a_p^\lambda n_{F(\xi_p^{(\lambda)})} \right\}, \quad (51)$$

$$\xi_p^{(\pm)} = \pm \sqrt{\left(\frac{\tau}{2}\right)^2 + 2f_p f_e t_p^2} - \mu.$$

Для нахождения уравнения состояния при $H \neq 0$ выразим числа заполнения трехчастичных состояний через одночастичную функцию Грина в совпадающих точках.

Уравнения для вариаций трехчастичных чисел заполнения $\delta n_{III}^{(3\sigma/2)}$, $\delta n_{III}^{(\sigma/2)} = -\delta n_{III}^{(-\sigma/2)}$ можно получить из общего уравнения для среднего значения T -произведений оператора уничтожения (49) на линейную комбинацию трех сопряженных операторов с произвольными коэффициентами γ_s :

$$g_1 \gamma_1 n_{III}^{(3\sigma/2)} + g_2 \gamma_2 n_{III}^{(\sigma/2)} + g_3 \gamma_3 n_{III}^{(-\sigma/2)} = T \sum_{1 \leq k, n \leq 3} \sum_{\omega, \rho, k} g_k G_\omega^{k, n}(\mathbf{p}) \gamma_n f_n \exp(i\omega\delta). \quad (52)$$

Матричные элементы одночастичной функции Грина выражаются через обратную матрицу, где теперь каждая строка и столбец, отвечающие p -состояниям, имеют утроенное число компонент. Соответствующие матричные элементы определяются через генеалогические коэффициенты g_k , входящие в разложение (49). Так, для выделенного оператора $\hat{a} = \hat{p}_{x\sigma}$ три первых строки обратной функции Грина могут быть записаны следующим образом:

$$\hat{G}_\omega^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{matrix} & s = 1 & s = 2 & s = 3 & s = 4, 5, \dots \\ \begin{matrix} \left(\frac{1}{2}\sigma \rightarrow \frac{3}{2}\sigma\right); & k = 1 \\ \left(-\frac{1}{2}\sigma \rightarrow \frac{1}{2}\sigma\right); & k = 2 \\ \left(-\frac{3}{2}\sigma \rightarrow -\frac{1}{2}\sigma\right); & k = 3 \\ k = 4, 5, \dots \end{matrix} & \begin{pmatrix} i\omega - \epsilon_p & 0 & 0 & -f_1 g_1 \rho_s^p \\ 0 & i\omega - \epsilon_p & 0 & -f_2 g_2 \rho_s^p \\ 0 & 0 & i\omega - \epsilon_p & -f_3 g_3 \rho_s^p \\ -\nu_p^k g_1 & -\nu_p^k g_2 & -\nu_p^k g_3 & \tau_{k,s} \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (53)$$

Здесь $g_1 = 1$, $g_2 = \sqrt{2/3}$, $g_3 = \sqrt{1/3}$, а концевые множители определены через суммы чисел заполнения для двух- и трехчастичных состояний:

$$f_1^\sigma = n_{III}^{(3\sigma/2)} + n_{II}^\sigma, \quad f_2^\sigma = n_{III}^{(\sigma/2)} + n_{II}^0, \quad f_1^\sigma = n_{III}^{(-\sigma/2)} + n_{II}^{-\sigma}.$$

Используя явный вид матричных элементов обратной матрицы, удастся вычислить суммы, входящие в правую сторону соотношения (53). Если заметить, что энергии переходов, сопровождающихся рождением одного и того же p_x -состояния, одинаковы, т. е. $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_p$, тогда суммы

$$\sum_{k=1}^3 g_k G_{\omega}^{k,s}(\mathbf{p}) = g_s (i\omega - \epsilon_p)^2 \frac{\det \tau_{n,m}}{\det G^{-1}}. \quad (54)$$

Проводя суммирование обеих сторон этого соотношения по импульсам и частотам, находим результат, пропорциональный значениям генеалогических коэффициентов g_s :

$$T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \sum_{k=1}^3 g_k G_{\omega}^{k,s}(\mathbf{p}) = g_s K_p(H).$$

В результате имеем соотношение при произвольных γ_k :

$$g_1 \gamma_1 n_{\text{III}}^{(3\sigma/2)} + g_2 \gamma_2 n_{\text{III}}^{(\sigma/2)} + g_3 \gamma_3 n_{\text{III}}^{(-\sigma/2)} = K_p(H) \sum_{s=1,2,3} g_s \gamma_s f_s. \quad (55)$$

Если считать вектор γ ортогональным вектору \mathbf{g} , т. е.

$$\sum_{1 \leq k \leq 3} g_k \gamma_k = 0,$$

можно получить два соотношения, не зависящие явно от вариации магнитного поля.

Первое уравнение находим при условии $g_1 \gamma_1 = g_3 \gamma_3$, $g_2 \gamma_2 = -2g_1 \gamma_1$:

$$\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} = 3\delta n_{\text{III}}^{(1/2)}. \quad (56)$$

Если же положить $\gamma_2 = 0$, $g_3 \gamma_3 = -g_1 \gamma_1$, то имеем второе уравнение:

$$(1 - K_p)(\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} + \delta n_{\text{III}}^{(1/2)}) - 2K_p \delta n_{\text{II}} = 0. \quad (57)$$

Вариации конечных множителей выражаются через вариации чисел заполнения:

$$\delta f_1 = \delta n_{\text{III}}^{(3/2)} + \delta n_{\text{II}}, \quad \delta f_2 = \delta n_{\text{III}}^{(1/2)}, \quad \delta f_3 = \delta n_{\text{III}}^{(-1/2)} - \delta n_{\text{II}}. \quad (58)$$

Используя дополнительное условие: $\delta n_{\text{III}}^{(-1/2)} = -\delta n_{\text{III}}^{(1/2)}$, находим обратные соотношения:

$$\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} = \delta f_1 + \delta f_2 + \delta f_3, \quad \delta n_{\text{III}}^{(1/2)} = \delta f_2; \quad \delta n_{\text{II}} = -\delta f_2 - \delta f_3. \quad (59)$$

Вариация виртуальной функции Грина $\delta K_p(H)$ содержит три типа слагаемых:

$$\begin{aligned} & g_1^2 \delta n_{\text{III}}^{(3\sigma/2)} + g_2^2 \delta n_{\text{III}}^{(\sigma/2)} + g_3^2 \delta n_{\text{III}}^{(-\sigma/2)} = \\ & = [K_p + L_p] \sum_{k=1,2,3} g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + g^2 \frac{f_e}{f_p} L_e \delta f_e - g^2 f_p R_p \sigma \delta H, \end{aligned} \quad (60)$$

где коэффициенты $L_{p,e}$ определяются общей формулой (8):

$$R_p = \frac{1}{3} \left[n'_F(\epsilon_p) + 2 \sum_{p,\lambda=\pm} a_p^{(\lambda)} n'_F(\xi_p^{(\lambda)}) \right], \quad a_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{r}{\sqrt{r^2 + 4g^2 f_e f_p \tau_p^2}} \right]. \quad (61)$$

Таким образом, мы получаем те же уравнения(15)–(17), но с другими определениями величин:

$$g^2 = 2, \quad g_1^2 = 1, \quad g_2^2 = \frac{2}{3}, \quad g_3^2 = \frac{1}{3}, \quad K_p = 9 \frac{n_p - 2}{5n_p - 6}. \quad (62)$$

Уравнение, определяющее вариацию n_e , имеет вид аналогичный (22) и (23):

$$\delta n_d^{(\sigma)} = 2\delta f_e^{(\sigma)} = L_e \frac{f_e}{g^2 f_p} \sum_{k=1,2,3} g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + [K_e + L_e] \delta f_e - f_d R_d \sigma \delta H. \quad (63)$$

Все коэффициенты вычисляются при нулевом магнитном поле:

$$K_e = \frac{n_e}{4 - 3n_e}, \quad R_e = \sum_{p,\lambda=\pm} a_p^{(\lambda)} n'_F(\xi_p^{(\lambda)}). \quad (64)$$

Таким образом, мы имеем систему из четырех уравнений, из которой находим условие возникновения ферромагнетизма:

$$\det \begin{pmatrix} 1 - g_1^2(K_p + L_p) & 4/3 - g_2^2(K_p + L_p) & 1 - g_3^2(K_p + L_p) & -g^2 f_p L_p / f_e \\ -1 & +2 & -1 & 0 \\ 1 - K_p & 2 & 1 + K_p & 0 \\ -g_1^2 f_e L_e / g^2 f_p & -g_2^2 f_e L_p / g^2 f_p & -g_3^2 f_e / g^2 f_p & 1 - K_e - L_e \end{pmatrix} = 0. \quad (65)$$

Вычисление определителя дает следующее условие:

$$(1 - K_e) [K_p(1 - K_p) - L_p(2/3 + K_p)] - L_e K_p(1 - K_p) = 0 \quad \text{для } n_e < 1, \quad 1 < n_p < 2. \quad (66)$$

При этом

$$K_p = 9 \frac{(n_p - 2)}{5n_p - 6}, \quad K_e = \frac{n_e}{4 - 3n_e}, \quad n_p = 6 \frac{3 - K_p}{9 - 5K_p}, \quad n_e = 4 \frac{K_e}{1 + 3K_e}. \quad (64')$$

Сравнение уравнения (66) с уравнением (43) показывает, что при переходе случая резонанса между одно- и двухчастичными состояниями к резонансу между двух- и трехчастичными состояниями происходит просто увеличение интенсивности эффективной амплитуды рассеяния, поскольку во втором случае безразмерная амплитуда L_p умножается на удвоенный коэффициент $2/3$ вместо коэффициента $1/3$ в первом случае.

Область концентраций $1 < n_e < 2, 2 < n_p < 3$

Уравнения согласования (41), записанные для вариаций трехчастичных p -состояний, приобретают лишнее слагаемое, связанное с возможной вариацией одно- и двухчастичных e -состояний:

$$g_1^2 \delta n_{III}^{(3\sigma/2)} + g_2^2 \delta n_{III}^{(\sigma/2)} + g_3^2 \delta n_{III}^{(-\sigma/2)} =$$

$$= [K_p + L_p] \sum_{k=1,2,3} g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + g_p^2 \frac{f_p}{g_e^2 f_e} L_d \sum_{\alpha=1,2} \delta g_{\alpha,e}^2 f_{\alpha,e}^\sigma - g_p^2 f_p R_p \sigma \delta H. \quad (67)$$

Уравнения (37) и (38) для связи между вариациями трех- и двухчастичных p -состояний остаются без изменения.

Уравнения типа (31) для вариации двухчастичных d -состояний приобретают три новых слагаемых в правой части:

$$\begin{aligned} \delta n_{II}^{(\sigma)} &= \delta f_{2,e}^{(\sigma)} + \delta f_{1,e}^{(\sigma)} = \\ &= [K_e + L_e] \sum_{\alpha=1,2} g_\alpha^2 \delta f_{\alpha,e}^{(\sigma)} + g_e^2 \frac{f_e}{g_p^2 f_p} L_e \sum_{k=1,2,3} \delta f_{k,p}^\sigma - g_e^2 f_e R_e \sigma \delta H. \end{aligned} \quad (68)$$

Уравнение (28), связывающее вариации одночастичных и двухчастичных p -состояний, остается без изменения.

Таким образом, мы имеем систему пяти уравнений, из которой находим условие возникновения ферромагнетизма.

Получаем условие вполне аналогичное (46), но с удвоенным коэффициентом перед безразмерной амплитудой L_p :

$$K_p K_e (1 - K_p)(1 - K_e) = L_p K_e (1 - K_e)(2/3 + K_p) + L_e K_p (1 - K_p)(1/3 + K_d), \quad (69)$$

$$K_p = 9 \frac{(n_p - 2)}{(5n_p - 6)}, \quad K_e = 4 \frac{(1 - n_e)}{(2 + n_e)}, \quad n_p = 6 \frac{3 - K_p}{9 - 5K_p}, \quad n_e = 2 \frac{K_e + 2}{4 - K_e}. \quad (70)$$

Области концентраций $2 < n_e < 4$, $0 < n_p < 3$ и $0 < n_e < 4$, $3 < n_p < 6$

Для перехода к области $2 < n_e < 4$, $0 < n_p < 2$ можно использовать уравнения предыдущих разделов, в которых проведено преобразование частично-дырочной симметрии для e_g -электронов: $n_e \rightarrow (4 - n_e)$, $K_e \rightarrow (1 - K_e)$, $L_e \rightarrow -L_e$.

Два первых преобразования отвечают переходу от частиц к дыркам для четырехкратно-вырожденной e_g -оболочки. Последнее преобразование соответствует изменению знака амплитуды e - e -рассеяния при переходе от частиц к дыркам, что приводит к существенному изменению магнитной фазовой диаграммы.

Оставшаяся часть фазовой диаграммы для $0 < n_e < 4$, $3 < n_p < 6$ может быть получена из соотношений предыдущих разделов с помощью общих преобразований частично дырочной симметрии: $n_d \rightarrow 4 - n_d$, $n_p \rightarrow 6 - n_p$.

3. МОДЕЛЬ СТЕПЕННОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Вычислим интегралы (17), (18) для модели с плотностью состояний $\rho(\epsilon) = (2/3)\sqrt{\epsilon}\theta(\epsilon)\theta(1 - \epsilon)$. В случае заполнения нижней подзоны, когда химический потенциал изменяется в отрицательной области от $-|r/2|\sqrt{1+s}$ до $-|r/2|$, где $s = 12g_e^2 g_p^2 f_e f_p t^2 / r^2$, при $T = 0$ имеем

$$K_p = \frac{1}{3} \left\{ 1 - z^{3/2} - \frac{3\text{sign}(r)}{2} W(s, z) \right\}, \quad K_e = \frac{1}{2} \left\{ 1 - z^{3/2} + \frac{3\text{sign}(r)}{2} W(s, z) \right\}. \quad (71)$$

Здесь и ниже используется следующая функция:

$$W(s, z) = \frac{\sqrt{1+s} - \sqrt{z(1+sz)}}{s} - \frac{1}{s\sqrt{s}} \ln \left(\frac{\sqrt{s} + \sqrt{1+s}}{\sqrt{zs} + \sqrt{1+sz}} \right). \quad (72)$$

Вместо отрицательного химического потенциала μ здесь введено обозначение $-\mu = \sqrt{1+sz}$.

Для выбранной степенной плотности состояний функции $L_{p,e}$ выражаются через $K_{p,e}$:

$$L_p = \frac{1}{2} - \frac{\text{sign}(r)}{2\sqrt{1+s}} - \frac{3}{2}K_p, \quad L_e = \frac{3}{4} + \frac{3\text{sign}(r)}{4\sqrt{1+s}} - \frac{3}{2}K_e. \quad (73)$$

Здесь $s > 0$, а параметр z меняется от нуля до единицы. При этом амплитуды $L_{p,e}$ для всех s и z остаются положительными.

В случае заполнения верхней подзоны, когда химический потенциал изменяется в положительной области от $|r/2|$ до $|r/2|\sqrt{1+s}$, имеем

$$K_p = \frac{1}{3} \left\{ 2 + z^{3/2} - \frac{3\text{sign}(r)}{2}W(s, z) \right\}, \quad K_e = \frac{1}{2} \left\{ 1 + z^{3/2} + \frac{3\text{sign}(r)}{2}W(s, z) \right\}, \quad (74)$$

$$L_p = 1 - \frac{\text{sign}(r)}{2\sqrt{1+s}} - \frac{3}{2}K_p, \quad L_e = \frac{3}{4} + \frac{3\text{sign}(r)}{4\sqrt{1+s}} - \frac{3}{2}K_e. \quad (75)$$

И здесь параметр z меняется от нуля до единицы, однако безразмерная амплитуда $L_{p,e}$ остается отрицательной.

Отсюда заключаем, что в области изменения чисел заполнения $0 < n_p < 2$ и $0 < n_e < 2$ ферромагнитные области могут существовать только для отрицательных значений химического потенциала (см. рис. 2).

4. ОБЩИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Можно записать все результаты в виде единого уравнения с постоянными коэффициентами, каждый из которых имеет определенное значение внутри квадратной области изменения переменных $n_{p,d}$:

$$K_p(1 - K_p)K_e(1 - K_e) = L_e(\Gamma_e + K_e)K_p(1 - K_p) + L_pK_e(1 - K_e)(\Gamma_p + K_p). \quad (76)$$

Все коэффициенты определены в таблице.

Используя результаты, взятые из таблицы, можно заметить, что изменение знака амплитуды e - e -рассеяния в области ($2 < n_e < 4$) при фиксированном знаке амплитуды p - p -рассеяния в области $0 < n_p < 3$ приводит к их существенной компенсации. В результате происходит уменьшение правой части уравнения (76), тогда как левая часть остается неизменной, поскольку она инвариантна относительно частично-дырочного преобразования для p - и e - электронов по отдельности.

По этой причине гибридизация состояний из нижних хаббардовских подзон $n_p < 3$ и состояний из верхней половины e -подзоны $2 < n_e$ не приводит к возникновению ферромагнетизма (см. рис. 2).

Области	f_p	K_p	g_p^2	$S_{[n_p]}$	$R_{[n_p]+1}$	Γ_p	SS
$0 < n_p < 1$	$(6 - 5n_p)/6$	$n_p/(6 - 5n_p)$	1	0	6	0	t_{2g}
$1 < n_p < 2$	$(4 - n_p)/18$	$2(n_p - 1)/(4 - n_p)$	3	1/2	9	1/3	t_{2g}^2
$2 < n_p < 3$	$(5n_p - 6)/36$	$9(n_p - 2)/(5n_p - 6)$	2	1	4	2/3	t_{2g}^3
$3 < n_p < 4$	$(24 - 5n_p)/36$	$4(n_p - 3)/(24 - 5n_p)$	2	3/2	9	-5/3	t_{2g}^4
$4 < n_p < 5$	$(n_p - 2)/18$	$3(n_p - 4)/(n_p - 2)$	3	1	6	-4/3	t_{2g}^5
$5 < n_p < 6$	$(5n_p - 24)/6$	$6(n_p - 5)/(5n_p - 24)$	1	1/2	1	-1	t_{2g}^6
Области	f_e	K_e	g_e^2	$S_{[n_e]}$	$R_{[n_e]+1}$	Γ_e	SS
$0 < n_e < 1$	$(4 - 3n_e)/4$	$n_e/(4 - 3n_e)$	1	1/2	4	0	e_g
$1 < n_e < 2$	$(2 + n_e)/12$	$4(n_e - 1)/(2 + n_e)$	3/2	1/2	3	1/3	e_g^2
$2 < n_e < 3$	$(6 - n_e)/12$	$3(n_e - 2)/(6 - n_e)$	3/2	1	4	-4/3	e_g^3
$3 < n_e < 4$	$(3n_e - 8)/4$	$4(n_e - 3)/(3n_e - 8)$	1	1/2	4	-1	e_g^4

Как видно из рисунка, для выбранной затравочной плотности состояний ферромагнитная неустойчивость не возникает также в области малых $n_{p,e} < 1$. Для отрицательного химического потенциала здесь система размазана между большим числом пустых (немагнитных) и малым числом одночастичных состояний со спином 1/2. Таким образом, в этой области осуществляется газовое парамагнитное состояние, аналогично тому как это происходит в классической модели Хаббарда [2].

В остальных областях, где, например, $n_e > 1$, система представляет собой смесь магнитных состояний. Существование конечной отрицательной амплитуды рассеяния для возбуждений с одинаковой по знаку проекцией спина (или положительной амплитуды для рассеяния возбуждений с противоположными спинами) приводит к возникновению ферромагнитной неустойчивости уже при малом числе возбужденных состояний. Аналогичный результат был получен в работе [6].

Такая ситуация возникает при гибридизации и одновременном заполнении нижних хаббардовских p - и e -подзон.

Если же происходит одновременное заполнение верхней подзоны для e -состояний и нижней подзоны для p -состояний, то физическая ситуация усложняется.

Вычисления показывают, что при заполнении нижней половины гибридизованной подзоны (отрицательный химический потенциал) мы обнаруживаем отрицательную амплитуду e - e -рассеяния и положительную амплитуду p - p -рассеяния для возбуждений с противоположными спинами. При заполнении верхней половины гибридизованной подзоны (положительный химический потенциал) ситуация обратная: мы обнаруживаем положительную амплитуду e - e -рассеяния и отрицательную амплитуду p - p -рассеяния для возбуждений с противоположными спинами.

Взаимное влияние этих взаимодействий как раз и определяет возможность возникновения ферромагнетизма. Расчеты, проделанные в настоящей работе, указывают на существенную компенсацию амплитуд при произвольной концентрации n_p и n_e -состояний (см. правую половину рис. 2).

Для сравнения с экспериментом на ферромагнитных ОЦК-соединениях FeAl и MnSi заметим, что в данном случае в силу электронейтральности суммарное число электронов на недозаполненных оболочках равно девяти: $n_d + n_p + n_s = 9$. Здесь n_d —

полное число d -электронов, приходящееся на ячейку, которое отличается от нашего n_e на число 6, равное полному числу электронов на заполненной t_{2g} -оболочке.

Величина n_s фактически есть подгоночный параметр. Согласно зонным расчетам [5] его значение равно 0.84 и 0.82 соответственно для железа и марганца.

Подставляя эти числа в уравнение электронейтральности, находим:

$$n_e + n_p = 2.16 \text{ для FeAl}, \quad n_e + n_p = 2.18 \text{ для MnSi}. \quad (77)$$

На рисунке эти линии практически совпадают, линия электронейтральности, соответствующая для FeAl, несколько ниже линии, соответствующей MnSi. Обе эти линии пересекают две заштрихованные области существования ферромагнитного упорядочения, полученные в нашей модели.

Предположим, что средний заряд анионов достаточно мал: для Al $n_p \approx 1$, для Si $n_p \approx 2$. Тогда для FeAl $n_e \approx 1$, в то время как для MnSi $n_e \ll 1$. Таким образом, мы приходим к качественному согласию с экспериментом: величина магнитного момента в соединении MnSi мала, момент насыщения в ферромагнитном FeAl большой (≈ 1), см., например, [7].

Можно заметить, что предлагаемый механизм возникновения ферромагнитной неустойчивости допускает возможность пересечения границы фазового превращения и линии электронейтральности. Этой ситуации соответствует феноменологическая теория Киттеля [8], согласно которой константа обменного взаимодействия изменяет знак при некотором критическом значении объема элементарной ячейки (см. также [9]).

Существует и другая возможность, когда линия электронейтральности пересекает прямую линию целочисленных значений $n_k = [n_k]$, как это происходит в нашем случае. Однако можно показать, что к этой прямой примыкает область $(n_k - [n_k]) \leq |t|/U$, внутри которой происходит переход к локализованным моментам. Сделанное в настоящей работе предположение о бесконечной энергии Хаббарда U делает рассмотрение этой области невозможным, а физические явления в узкой области, $(n_k - [n_k]) \ll |t|/U$, заслуживают специального рассмотрения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-02-17388).

Литература

1. J. C. Slater and G. F. Koster, Phys. Rev. **94**, 1498 (1954).
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, N1365, 238 (1963).
3. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
4. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **2**, 1650 (1968).
5. У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел*, т. 2, Мир, Москва (1983).
6. Т. Momoi and K. Kubo, Phys. Rev. B **58**, R567 (1998).
7. *Физические величины*, гл. 27, справочник под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова, Энегаотомиздат, Москва (1991).
8. C. Kittel, Phys. Rev. **120**, 335 (1960).
9. C. P. Bean and D. S. Rodbell, Phys. Rev. **126**, 104 (1962).