

# ФЕРРОМАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В ВАНДЕРВААЛЬСОВОМ СОЕДИНЕНИИ $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$

*В. В. Меньшенин\**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М. Н. Михеева  
Уральского отделения Российской академии наук  
620108, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 1 августа 2023 г.,  
после переработки 7 сентября 2023 г.  
Принята к публикации 7 сентября 2023 г.

Исследован фазовый переход из парамагнитной в ферромагнитную фазу в вандерваальсовом объемном соединении  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Использован ренормгрупповой подход, действие для которого построено с использованием теоретико-группового анализа определения неприводимого представления пространственной группы, ответственного за этот переход, в случае локализованных на железе магнитных моментов. Показано, что такое представление, допускающее ориентацию магнитных моментов вдоль оси  $c$  кристалла, существует. Влияние вакансий в одной из позиций железа на этот переход рассмотрено с помощью метода реплик по аналогии с описанием замороженных примесей. Найден степенной закон изменения намагниченности вблизи перехода с учетом наличия вакансий. Определено условие, когда вакансии подавляют этот переход. Возможное влияние сильных электронных корреляций и свободных электронов на устойчивость ферромагнитной фазы проанализировано с помощью  $t$ - $J$ -модели для невырожденных электронов. В обобщенном приближении случайных фаз дополнительный вклад свободных электронов в формирование дальнего ферромагнитного порядка осуществляется через паулиевскую восприимчивость газа свободных электронов. Выписано условие устойчивости ферромагнитного состояния в этом случае.

DOI: 10.31857/S0044451024030088

практически однослойную структуру этого соединения пока получить не удалось.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Слоистые материалы со слабой межслойной вандерваальсовой связью вызывают повышенный интерес. Связано это с тем, что свойствами системы можно управлять, заменяя одни слои на другие или понижая размерность соединения, выделяя однослойные компоненты. Понижение же размерности приводит к усилению квантовых эффектов, что может оказаться полезным в приложениях. Примером такого соединения является дихалькогенид железа  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Это соединение является металлическим ферромагнетиком [1–3]. При этом из расчетов на основе функционала плотности найдено, что дальний порядок сохраняется вплоть до одного слоя. Поэтому данное соединение является перспективным для устройств хранения информации. Отметим, что

Соединение  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  впервые было синтезировано в 2006 году [1]. Оно кристаллизуется в гексагональную структуру, описываемую пространственной группой  $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ . Атомы железа занимают две неэквивалентные кристаллографические позиции, обозначаемые в [4] как  $2c$  и  $4e$  соответственно. Для стехиометрического состава при условии полной занятости для позиций Fe смешанная валентная формула для атома переходного металла может быть записана согласно  $(\text{Fe}^{2+}) (\text{Fe}_2^{3+}) (\text{Ge}^{4-}) (\text{Te}_2^{2-})$  [1]. Соединение является слоистым. Каждый слой представляет собой сэндвич-структуру с двумя слоями атомов теллура, покрывающими тройной слой  $\text{Fe}_3\text{Ge}$  с обеих сторон [1]. Ниже 230 К была обнаружена спонтанная намагниченность, указывающая на ферромагнитное поведение. Имеет место сильная магнитная анизотропия вдоль оси  $c$  кристалла. Вакансии, имеющиеся в позиции  $2c$ , подавляют ферромагнитное упорядочение.

\* E-mail: menshenin@imp.uran.ru

В литературе вызывает много споров вопрос о природе дальнего магнитного порядка. В некоторых работах утверждается, что это соединение является зонным магнетиком [2, 3]. В этом случае, как утверждают авторы этих работ, выполняется критерий Стонера для ферромагнитного упорядочения.

Обратим теперь внимание на применимость самого критерия Стонера к системам с сильными электронными корреляциями. О наличии таких корреляций в рассматриваемом соединении указано в работе [3]. Он может быть получен для этих систем из гамильтониана Хаббарда [5] в приближении, когда двухчастичное кулоновское отталкивание заменяется одночастичным взаимодействием. Однако это приближение физически является очень грубым. Дело в том, что по порядку величины плотность состояний на уровне Ферми обратно пропорциональна энергии Ферми. Сама же энергия Ферми по порядку величины равна интегралу перескока электрона на другой узел. Критерий Стонера позволяет прийти к заключению, что параметр кулоновского отталкивания на узле по порядку величины равен интегралу перескока. Поэтому теория возмущений по параметру, равному отношению кулоновского отталкивания к интегралу перескока, не справедлива ввиду того, что это отношение оказывается порядка единицы. Сам же критерий Стонера получен именно на основе этой теории возмущений. Кроме того, критерий Стонера завышает устойчивость ферромагнитной фазы.

В других работах [6–8] обращается внимание на то, что только наличием свободных электронов ферромагнетизм в этом соединении не описывается и нужно учитывать вклад локализованных электронов, а также наличие сильных электронных корреляций. Высказано также мнение, что магнитные свойства могут описываться в модели Гейзенберга локализованных магнитных моментов [9, 10].

Отметим для полноты картины, что объемное соединение  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  демонстрирует большой аномальный эффект Холла [11], физику кондо-решетки [12], сильное увеличение массы электрона [13] и магнитокалорический эффект.

Цель настоящей работы состояла в анализе магнитного фазового перехода из парамагнитной фазы в ферромагнитную фазу на основе ренормгруппового подхода. При этом в рамках теоретико-группового рассмотрения находится неприводимое представление пространственной группы, по которому происходит переход, и построено действие, инвариантное относительно этого представления. Влияние вакансий в позициях железа на этот переход описы-

вается в предположении, что они могут рассматриваться, исходя из метода реплик, по аналогии с вброженными примесями. В рамках  $t$ - $J$ -модели проанализирована устойчивость ферромагнитной фазы, принимая во внимание сильные электронные корреляции, о наличии которых в этом соединении упоминалось выше.

## 2. МАГНИТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГРУППЫ $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$

Во Введении уже было сказано, что соединение  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  обладает фазовым переходом из парамагнитной в ферромагнитную фазу с сильной  $c$ -осевой анизотропией ниже 230 К. Магнитоупорядоченная фаза подавляется с увеличением концентрации вакансий. При этом вакансии наблюдаются только в позиции  $2c$  атомов железа. Проанализируем этот переход исходя из теории фазовых переходов второго рода. Результаты упругого нейтронного рассеяния, приведенные в работе [6] на рис. 1, указывают на то, что этот переход относится ко второму роду.

Найдем прежде всего неприводимое представление (НП) пространственной группы  $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ , по которому может происходить этот переход. В данном подходе мы считаем, что на ионах железа, находящихся в кристаллографических позициях [4]  $2c(3d^6)$  и  $4e(3d^5)$  локализованы магнитные моменты. Это представление должно входить в состав магнитного представления пространственной группы. Поэтому нам необходимо сначала определить характеры магнитного представления. Найдем последние.

Используя равенство [14]

$$g\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_i + \mathbf{a}_p, \quad (1)$$

где  $g$  — элемент пространственной группы,  $\mathbf{r}_j$  — начальное положение иона железа в нулевой ячейке,  $\mathbf{r}_i$  — его конечное положение в этой ячейке,  $\mathbf{a}_p$  — возвращающая трансляция, с помощью которой атом возвращается в нулевую ячейку, определим те элементы пространственной группы, которые оставляют атомы железа на месте. Рассмотрим сначала ионы железа в позиции  $2c$ . В этой позиции в нулевой ячейке координаты атомов равны [15]  $(2/3, 4/3, 1/2)$  и  $(4/3, 2/3, 3/2)$ . Они заданы в гексагональной системе координат. Установка в [15] совпадает с установкой в интернациональных таблицах [4].

С помощью равенства (1) просто показать, что атомы 1 и 2 не меняют своих позиций (с точностью до возвращающих трансляций) под действием сле-

дующих элементов пространственной группы (в обозначениях монографии [15]):

$$e, h_3, h_5, h_8, h_{10}, h_{12}, h_{14}, h_{16}, h_{18}, h_{19}, h_{21}, h_{23},$$

где указана только «вращательная» часть элемента пространственной группы  $g_i = \{h_i | \tau_i\}$ ,  $\tau_i$  — нетривиальная трансляция. Атомы меняются местами под действием оставшихся элементов группы. Для позиции  $4e$  атомы железа не меняют своего положения под действием элементов  $e, h_3, h_5, h_{19}, h_{21}, h_{23}$ . Найдем теперь характеры элементов магнитного представления, которые для нулевого волнового вектора определяются равенствами [14]

$$\chi_m^{\mathbf{k}=0} = \text{Sp } R_h \delta_h \sum_j \delta_{j,gj}, \quad (2)$$

где  $\chi_m^{\mathbf{k}=0}$  — характер элемента группы,  $\text{Sp } R_h$  — сумма диагональных элементов вращательной части элемента  $g$ ,  $\delta_h = 1$  для элементов первого рода [16] и  $\delta_h = -1$  для элементов второго рода, дельта-символ  $\delta_{j,gj}$  означает, что суммирование идет по тем атомам, которые не перемещаются под действием элемента  $g$ . Из равенства (2) получим следующие значения отличных от нуля характеров элементов в магнитном представлении

$$\chi_m^{\mathbf{k}=0}(e) = 18,$$

$$\chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_8) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{10}) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{12}) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{16}) = -2, \quad (3)$$

$$\chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{19}) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{21}) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{23}) = -6,$$

$$\chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{14}) = \chi_m^{\mathbf{k}=0}(g_{18}) = 4.$$

Характеры остальных элементов группы равны нулю. Обычным образом, используя данные монографии [15], касающиеся НП группы  $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ , находим, что в состав магнитного представления входят только два двукратных одномерных представления этой группы, а именно,  $2\tau_3$  и  $2\tau_6$ .

Рассмотрим сейчас величины [14]

$$S_\lambda^{\mathbf{k},\zeta}(i) = \sum_{h \in G_k^0} d_{\lambda[\mu]}^{*\mathbf{k}\zeta} \delta_{i,gj} \delta_h \times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_p(g, j)) \times \left( R_{x,[\beta]}^h, R_{y,[\beta]}^h, R_{z,[\beta]}^h \right), \quad (4)$$

которые могут трактоваться как векторы атомных магнитных моментов системы, образующих магнитную структуру с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . В равенстве (4)  $d_{\lambda[\mu]}^{*\mathbf{k}\zeta}$  — сопряженный матричный элемент

$\zeta$ -го НП пространственной группы, индексы  $\mu, j, \beta$  должны фиксироваться,  $G_k^0$  — точечная группа волнового вектора. Отметим, что для ферромагнитного упорядочения волновой вектор равен нулю.

Можно показать, исходя из равенства (4), что представление  $\tau_3$  позволяет существование только вектора  $\mathbf{S} = (0, 0, 1)$  на ионах железа в позиции  $2c$ , т.е. их магнитные моменты ориентированы вдоль оси  $z$ . Поскольку для намагниченности все элементы пространственной группы являются четными элементами [17], пространственная инверсия  $g_{13}$  в обозначениях монографии [15] не меняет направления магнитного момента,  $\{h_{13}|000\}M_z = \delta_{h_{13}}(-M_z) = M_z$ . Аналогичным образом устанавливается, что для позиции  $4e$  ионов железа представление  $\tau_3$  также допускает ориентацию магнитных моментов вдоль оси  $z$  кристалла. Это означает, что переход в ферромагнитное состояние должен происходить по представлению  $\tau_3$ . Таким образом, теория групп допускает переход в ферромагнитное состояние с анизотропией вдоль оси  $z$  только по НП  $\tau_3$ .

Отметим теперь, что разложение магнитного представления по НП пространственной группы с учетом двумерных представлений включает двумерные представления  $2\tau_9, 2\tau_{12}, \tau_{10}, \tau_{11}$ . Эти представления, однако, не генерируют векторов  $\mathbf{S}$ , ориентированных вдоль оси  $z$ .

Таким образом, мы приходим к выводу, что переход из парамагнитного состояния в ферромагнитную фазу может происходить только по представлению  $\tau_3$ , причем в формировании дальнего порядка участвуют атомы железа в обеих кристаллографических позициях. Отметим, что теоретико-групповой анализ подтверждает, что эта фаза будет иметь анизотропию вдоль оси  $z$ .

Вернемся теперь к представлению  $\tau_3$ . Фазовый переход из парамагнитной в ферромагнитную фазу характеризуется однокомпонентным параметром порядка, который обозначим как  $\varphi(x)$ . Тогда действие  $S$ , инвариантное относительно представления  $\tau_3$ , записывается в виде

$$S(\varphi) = \int d^d x \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} - \frac{\xi}{2} \varphi^2(x) - \frac{b}{24} \varphi^4(x) \right), \quad (5)$$

где  $\xi = T - T_C$ ,  $T$  — температура системы,  $T_C$  — затравочная температура Кюри,  $b$  — заряд [18] (константа, характеризующая взаимодействие в системе). Выражение (5) полностью совпадает с неренор-

мированным действием одномерной модели  $\varphi^4$ . Описание фазового перехода на основе этой модели методом ренормгруппы хорошо известно [19, 20]. Найдена устойчивая критическая точка и определены все критические индексы в 5-петлевом приближении. Мы не будем их здесь выписывать. Их можно найти, например, в монографии [18].

Влияние вакансий на этот фазовый переход проведем аналогично учету замороженных примесей в методе реплик. Тогда учет вакансий можно осуществить в виде добавки к обычному действию  $\varphi^4$  взаимодействия вида [21]

$$V_{vac} = \int d^d x \psi(x) \varphi^2(x), \quad (6)$$

где  $\psi(x)$  — гауссово случайное поле вакансий со средним значением

$$\langle \psi(x) \rangle = 0$$

и коррелятором

$$\Delta_\psi(x) = \langle \psi(x) \psi(x') \rangle = \lambda_0 \delta(x - x')$$

с затравочной константой  $\lambda_0 > 0$ , пропорциональной концентрации вакансий,  $d = 4 - 2\varepsilon$ ,  $\varepsilon \ll 1$ ,  $d$  — размерность пространства. Формальное описание вакансий методом реплик позволяет применить  $n$ -компонентное поле  $\varphi_a$ ,  $a = 1, \dots, n$  с неренормированным действием

$$S_1 = \int d^d x \left\{ -\frac{\psi^2(x)}{2\lambda_0} - \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} - \frac{\xi}{2} \varphi_a(x) \varphi_a(x) - \frac{b}{24} \sum_a \varphi_a^4(x) + \psi(x) \varphi_a(x) \varphi_a(x) \right\}. \quad (7)$$

В равенстве (7) подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Поскольку нас не интересуют свойства собственно вакансий, в действии (7) можно избавиться от поля  $\psi(x)$ . Проинтегрируем для этого функционал

$$Z = \int D\psi D\phi \exp \left\{ \int d^d x \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} - \frac{\xi}{2} \varphi_a(x) \varphi_a(x) - \frac{b}{24} \sum_a \varphi_a^4(x) \right) \right\} \times \exp \left\{ \int d^d x \left( -\frac{\psi^2(x)}{2\lambda_0} + \psi(x) \varphi_a(x) \varphi_a(x) \right) \right\}, \quad (8)$$

где

$$D\pi = \prod_a D\varphi_a,$$

имеющий смысл статистической суммы, по полю

$\psi(x)$ . Это можно сделать точно, так как функциональный интеграл по этому полю является гауссовым. Имеем

$$\int D\psi \exp \left\{ \int d^d x \left( -\frac{\psi^2(x)}{2\lambda_0} + \psi(x) \varphi_a(x) \varphi_a(x) \right) \right\} = \exp \left\{ \int d^d x \frac{\lambda_0}{2} (\varphi_a(x) \varphi_a(x))^2 \right\} \sqrt{2\pi\lambda_0}. \quad (9)$$

Тогда действие (7) может быть переписано в виде

$$S_1 = \int d^d x \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_a(x)}{\partial x} - \frac{\xi}{2} \varphi_a(x) \varphi_a(x) - \frac{b}{24} \sum_a \varphi_a^4(x) - \frac{b_1}{24} (\varphi_a(x) \varphi_a(x))^2 \right\}, \quad (10)$$

где  $b_1 = -12\lambda_0$ , а множитель  $\sqrt{2\pi\lambda_0}$  мы опустили как несущественный. Действие (10) представляет собой действие для двухзарядной  $O_n \varphi^4$ -модели. Полный анализ критического поведения такой модели в двухпетлевом приближении приведен в монографии [18]. Особенностью рассматриваемого случая является то, что в конце расчетов необходимо положить  $n = 0$  [18].

Оказывается, что в этом случае приходится строить разложения не по малому параметру  $\varepsilon$ , а по  $\sqrt{\varepsilon}$  [22]. Для этой ситуации в трехпетлевом приближении (в пределе  $n = 0$ ) найдены критические индексы [23]. Поведение намагниченности  $M$  в окрестности критической точки, исходя из данных [23], имеет вид

$$M \sim |T - T_c^*|^\beta, \quad \beta = \frac{1}{2} - \frac{3}{4} \left( \frac{6}{53} \right)^2 \sqrt{2\varepsilon} - \frac{1284 + 189\zeta(3)}{53^2} \varepsilon,$$

$T_c^*$  — температура перехода в ферромагнитную фазу,  $\zeta$  — дзета-функция Римана. Однако для рассматриваемой модели устойчивость критической точки может быть нарушена, если выполняется неравенство

$$-12\lambda_0 + b < 0. \quad (11)$$

С ростом концентрации вакансий положительная константа  $\lambda_0$  возрастает по величине, что приведет к выполнению (11). Тогда переход в ферромагнитную фазу будет подавлен.

Использованный выше подход, основанный на теоретико-групповом анализе, базировался на пред-

положении, что на ионах железа локализован магнитный момент. Обоснование его наличия в рамках зонной теории является следующим. В зонной теории металлов давно известно, что волновые функции  $d$ -состояний очень сильно локализованы внутри атомного остова. Поэтому их перекрытие между соседними атомами может приводить к образованию только узких зон. В переходных металлах не все внутренние  $d$ -уровни заполнены и они находятся близко к  $s$ - и  $p$ -уровням валентных электронов. Гибридизация  $s$ - и  $p$ -уровней приводит к возникновению зоны проводимости. Узкая  $d$ -зона находится внутри зоны проводимости и гибридизуется с ней в точках, где эти зоны пересекаются [24]. Эта гибридизация приводит к тому, что  $d$ -электроны оказываются лишь частично локализованными. Дело в том, что при образовании кристалла атомные волновые функции электронов исчезают из-за перекрытия атомных потенциалов. Однако это исчезновение не всегда будет полным; например, вблизи начальных  $d$ -уровней могут сохраниться виртуальные связанные состояния. Волновая функция в этих состояниях характеризуется большой амплитудой внутри остова, но не является строго там локализованной [24]. В результате электрон с большой вероятностью находится на переходном ионе, участвуя в формировании локального момента, но существует вероятность того, что он участвует и в проводимости. Однако этот одноэлектронный подход для обоснования появления локального магнитного момента в сильнокоррелированных металлах на основе  $3d$ -переходных металлах плохо работает. Более подходящим оказывается подход с использованием модели Хаббарда. Для сильного отталкивания двух электронов на узле в электронном спектре этой модели появляются две хаббардовские подзоны однократно и двукратно занятых состояний [25]. Если отталкивание на узле стремится к бесконечности, а среднее число электронов на узле меньше единицы, то число пар стремится к нулю. Тогда однократно занятые состояния формируют локальные магнитные моменты [25].

Подойдем поэтому к проблеме появления ферромагнитной фазы в соединении  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ , используя модель Хаббарда, а точнее  $t$ - $J$ -модель. Единственное условие, которое нам потребуется из предыдущего рассмотрения, состоит в том, что переход происходит по одномерному представлению. Поэтому сделаем предположение, что для описания ферромагнитного состояния можно использовать модель Хаббарда для невырожденных электронов. Поясним, что понимается под словами невырожденные

электроны в этой модели. Известно [24], что общая модель взаимодействующих электронов, зонная структура которых может быть описана в подходе сильной связи, чрезвычайно сложна для исследования. Значительное упрощение для изучения свойств таких электронов проводится в модели Хаббарда, в которой существенным для исследования является только один орбитально невырожденный уровень, а все другие уровни не включаются в рассмотрение. Последнее утверждение основано на предположении о большой энергетической щели между этими уровнями и выделенным уровнем.

В работе [6] приведено значение параметра  $U$ , описывающего кулоновское отталкивание электронов на одном узле,  $U \approx 5$  эВ. При таком большом значении параметра  $U$  слагаемое в гамильтониане Хаббарда, описывающее кулоновское отталкивание электронов на узле, рассматривается как гамильтониан нулевого приближения, а кинетическое слагаемое, связанное с перескоком электрона на соседний узел, играет роль возмущения [5]. Исключая из рассмотрения состояния системы с двумя электронами на узле и отбрасывая члены, зависящие от трех узлов, можно найти гамильтониан  $t$ - $J$ -модели, в котором гамильтониан нулевого приближения линеен по операторам Хаббарда, а возмущение квадратично по этим операторам. Последнее обстоятельство позволяет построить диаграммную технику для операторов Хаббарда, в которой электронная функция Грина и функции Грина для поперечных и продольных спиновых компонент существенно отличаются от таковых в диаграммной технике для фермионных и спиновых операторов [5].

Гамильтониан  $t$ - $J$ -модели имеет вид

$$H = t \sum_{i,j,\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + J \sum_{i,j} (X_i^{-+} X_j^{+-} - X_i^{++} X_j^{--}). \quad (12)$$

В гамильтониане (12)  $t$  — матричный элемент перескока электрона на соседний узел,  $X_i^{\alpha\beta}$  — оператор Хаббарда,  $\alpha, \beta = 0, +, -$ , где «+» означает состояние со спином вверх, «-» — состояние со спином вниз, «0» — состояние без спина на узле,  $J$  — обменный интеграл. Для этой модели в работе [5] показано, что фурье-образ функции Грина для поперечных спиновых компонент,

$$D_{\perp}(1-2) = \langle T \tilde{X}^{+-}(1) \tilde{X}^{-+}(2) \rangle, \quad (13)$$

где  $T$  — упорядочение по времени, символ «тильда» означает представление взаимодействия, в парамаг-

нитном состоянии в обобщенном приближении случайных фаз может быть записан в виде

$$-D_{\perp}^*(k) = \chi(k) = \chi_0(k)[1 - \Lambda(k)][1 - Q(k)] + \chi_0(k)[\Phi(k) + J(k)]^{-1}. \quad (14)$$

В последнем равенстве

$$\chi_0(k) = \frac{1}{2} \frac{n_0}{T} \delta_{\omega(n),0} - \Pi(k),$$

$\omega(n)$  — мацубаровская частота,

$$n_0 = 2 \exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \left(1 + 2 \exp\left(\frac{\mu}{T}\right)\right)^{-1},$$

а величины  $\Lambda, Q, \Pi, \Phi$  в парамагнитной фазе определяются равенствами

$$\begin{aligned} \Pi(k) &= \frac{1}{N} \sum_{k(1)} G(k(1) - k) G(k(1)), \\ Q(k) &= \frac{1}{N} \sum_{k(1)} \epsilon(k(1)) G(k(1) - k) G(k(1)), \\ \Lambda(k) &= \frac{1}{N} \sum_{k(1)} \epsilon(k(1) - k) G(k(1) - k) G(k(1)), \quad (15) \\ \Phi(k) &= \frac{1}{N} \sum_{k(1)} \epsilon(k(1) - k) \epsilon(k(1)) \times \\ &\quad \times G(k(1) - k) G(k(1)), \end{aligned}$$

где  $N$  — число узлов решетки. В последних соотношениях электронная функция Грина берется в виде

$$\begin{aligned} G(k) &= (i\omega(n) - E(\mathbf{k}))^{-1}, \\ E(\mathbf{k}) &= \left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon(\mathbf{k}) - \mu, \end{aligned} \quad (16)$$

где  $n$  — среднее число электронов на данном узле,  $\mu$  — химический потенциал.

После аналитического продолжения

$$i\omega(n) \rightarrow \omega + i\delta$$

выражение (14) описывает восприимчивость парамагнитной фазы. В монографии [5] сформулировано утверждение, что  $\chi_0(\mathbf{k}, \omega)$  представляет собой сумму вкладов от локализованных и коллективизированных состояний электронов. Локализованный вклад, обратно пропорциональный температуре, соответствует закону Кюри. Коллективизированный вклад является паулиевским. Этот вклад, связанный с электронной петлей, отвечает за восприимчивость газа невзаимодействующих свободных электронов. В этой же монографии показано, что при энергии Ферми  $\epsilon_F > 0$  парамагнитная фаза теряет

устойчивость при  $T = 0$ , как видно из (14) в случае выполнения условия

$$\Phi(0, 0) + \kappa t z < 0, \quad (17)$$

т. е.

$$\kappa t z < \frac{\epsilon_F^2}{(1 - n/2)^2} N \left( \frac{\epsilon_F}{1 - n/2} \right). \quad (18)$$

В неравенстве (17)  $\kappa = t/U$ ,  $z$  — число ближайших соседей,  $N(\epsilon)$  — плотность состояний исходной электронной зоны до ее расщепления на две хаббардовские подзоны [5]. Видно, что при  $k = 0$  ( $U \rightarrow \infty$ ) основное состояние ферромагнитно при нулевой температуре. С ростом  $\kappa$  ферромагнитное состояние подавляется. Таким образом, из  $t$ - $J$ -модели следует, что в формировании ферромагнитной фазы участвуют как локализованные, так и свободные электроны.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен анализ магнитного фазового перехода второго рода из парамагнитной в ферромагнитную фазу в слоистом вандерваальсовом соединении  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Важная составляющая этого рассмотрения состояла в том, чтобы установить тот факт, что локализованные на атомах железа магнитные моменты участвуют в формировании дальнего магнитного порядка. Это удалось сделать в рамках теоретико-группового определения неприводимого представления пространственной группы  $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ , по которому происходит переход, базирующемся на исходном предположении о наличии таких магнитных моментов. Показано, что магнитный переход в одноосный ферромагнетик с ориентацией момента вдоль оси  $c$  кристалла, может происходить только по представлению  $\tau_3$ , базисной функцией которого является магнитный момент с указанной выше ориентацией. Важно обратить внимание на то, что в теоретико-групповом анализе неявно приняты во внимание все взаимодействия, отвечающие за формирование как кристаллической структуры, так и магнитного состояния системы. Параметр порядка перехода оказывается одномерным. Построено действие системы, инвариантное относительно представления  $\tau_3$ . Это действие совпадает с действием одномерной  $\varphi^4$ -модели. Поэтому известны все критические индексы этого перехода, получаемые из ренормгруппового анализа.

Влияние вакансий на этот переход было осуществлено с помощью метода реплик и сведено к описанию двухзарядной  $O_n\varphi^4$ -модели в пределе  $n \rightarrow 0$  в конечных результатах. Ренормгрупповой анализ задачи в этом пределе проведен в работах,

указанных выше. На основе этих результатов найдено температурное поведение магнитного момента вблизи критической точки, а также приведено условие, при выполнении которого ферромагнетизм подавляется вакансиями.

Расчеты, проведенные в работе [6] на основе модели Хаббарда, показали, что для исследуемого соединения параметр отталкивания электронов на узле  $U \approx 5$  эВ. На основании этого результата в работе было сделано предположение, что устойчивость ферромагнитной фазы можно проанализировать с использованием  $t$ - $J$ -модели для невырожденных электронов. В этом случае удастся показать, что в формировании ферромагнитного упорядочения участвуют как локализованные, так и свободные электроны. Свободные электроны дают паулиевский вклад в динамическую магнитную восприимчивость системы.

Таким образом, критерий Стонера, являющийся указанием на то, что дальний магнитный порядок формируется только свободными электронами, не является точным в соединении  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ .

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания Шифр «Квант», грант № 122021000038-7.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H.-J. Deiseroth, K. Aleksandrov, C. Reiner et al., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006** (8), 1561 (2006).
2. H. L. Zhuang, P. R. C. Kent, *Phys. Rev. B* **93**, 134407 (2016).
3. A. F. May, S. Calder, C. Cantoni et al., *Phys. Rev. B* **93**, 014411 (2016).
4. *International Tables for Crystallography, Vol. A. Space Group Symmetry*, ed. by T. Hahn, Springer (2002).
5. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Физматлит, Москва (1994).
6. X. Bai and F. Lecherman, *Phys. Rev. B* **106**, L180409 (2022).
7. X. Xu, Y. W. Li, S. R. Duan et al., *Phys. Rev. B* **101**, 201104 (R) (2020).
8. J.-X. Zhu, N. Janoschek, D. S. Chaves et al., *Phys. Rev. B* **93**, 144404 (2016).
9. Y. Deng, Y. Yu, Y. Song et al., *Nature (London)* **563**, 94 (2018).
10. Y. Zhang, H. Lu, X. Zhy et al., *Sci. Adv.*, **4**, eaao6791 (2018).
11. K. Kim, J. Seo, E. Lee et al., *Nat. Mater.* **17**, 794 (2018).
12. M. Zhao, B.-B. Chen, Y. Xi et al., *Nano Lett.* **21**, 6117 (2021).
13. B. Chen, J. Yang, H. Wang et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 124711 (2013).
14. Ю. А. Изюмов, В. Е. Найш, Р. П. Озеров, *Нейтроннография магнетиков*, Атомиздат, Москва (1981).
15. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
16. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Наука, Москва (1979).
17. В. В. Меньшенин, *ФММ* **115**, 1121 (2014).
18. А. Н. Васильев, *Квантовополевого ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамики*, Изд-во ПИЯФ, Санкт-Петербург (1998).
19. K. G. Wilson and M. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).
20. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
21. A. V. Harris and T. C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1540 (1974).
22. Д. Е. Хмельницкий. *ЖЭТФ* **68**, 1960 (1975).
23. Б. Н. Шалаев, *ЖЭТФ* **73**, 2301 (1977).
24. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1974).
25. В. Ю. Ирхин, Ю. П. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях*, Екатеринбург (2004).