

# К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

*Р. О. Зайцев\**

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

Поступила в редакцию 4 июня 2002 г.

На основе представления о сильном взаимодействии в одной и той же элементарной ячейке установлена возможность существования ферромагнитной неустойчивости в системе с перескоками между катионами переходных элементов. Построена фазовая диаграмма существования ферромагнитного упорядочения в зависимости от среднего числа дырок ( $h_d$ ) в  $3d^{10}$ -оболочке переходных элементов.

PACS: 74.20.-z, 74.70.Ad, 74.20.Mn, 74.25.Dw

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Обменное взаимодействие свободных электронов, если его рассматривать как возмущение, всегда приводит к отрицательной поправке, что соответствует тенденции электронов к ферромагнетизму.

При изучении возбуждений локализованных  $s$ -электронов сильное хаббардовское отталкивание при малой плотности электронов также приводит к существенному увеличению спиновой части парамагнитной восприимчивости, однако при этом ферромагнетизм не возникает [1].

Будет показано, что амплитуда обменного рассеяния имеет отрицательный знак только для ограниченного интервала энергий, что соответствует конечному интервалу концентрации  $d$ -дырок.

Число  $4s$ -электронов, приходящихся на одну элементарную ячейку  $n_s$ , фактически есть подгоночный параметр. Согласно зонным расчетам, которые качественно подтверждаются экспериментом, его значение не превышает единицу.

Используя уравнение электронейтральности, находим, что среднее число  $3d$ -дырок  $h_d$ , приходящееся на одну ячейку, меньше единицы для Ni, находится в интервале от 1 до 2 для Co и от 2 до 3 для Fe.

Для каждого из перечисленных интервалов будет построена магнитная фазовая диаграмма и определена температурная зависимость магнитной вос-

приимчивости, относящейся к парамагнитной фазе. Будут рассмотрены также причины отсутствия ферромагнетизма марганца и хрома, палладия и платины, для которых соответственно  $3 < h_d < 5$  и  $h_d < 1$ .

Вычисления магнитной восприимчивости проводятся в рамках однопетлевого приближения с использованием затравочной полуэллиптической плотности состояний. Соответствующая полуширина есть единственный энергетический параметр, поскольку во всех случаях энергия Хаббарда считается бесконечной.

## 2. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

После проведения диагонализации нулевого гамильтониана, соответствующего неперекрывающимся атомным состояниям, операторы рождения и уничтожения представляются в виде разложения по всевозможным переходам между  $N$ - и  $(N + 1)$ -дырочными состояниями:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{(m,\sigma)}^+(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^{m,\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha}, \\ \hat{a}_{(n,\sigma)}(\mathbf{r}) &= \sum_{\beta} g_{\beta}^{n,\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\beta}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь индексы « $\alpha$ », « $\beta$ » отвечают взаимно обратным переходам  $s \rightarrow m$ , т. е.  $\beta(m, s) = -\alpha(s, m)$ . Величины  $g_{\alpha}^{m,\sigma}$  называются генеалогическими коэффициентами и вычисляются ниже.

\*E-mail: zaitsev@mbslab.kiae.ru

Уравнения для нахождения средних чисел заполнения  $n_m$  находим из определения температурной функции Грина, вычисленной для каждой пары сопряженных  $X$ -операторов (см. [2]):

$$D^{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau') = -\Theta(\tau - \tau') \langle X_{\mathbf{r}}^{\alpha}(\tau) X_{\mathbf{r}'}^{\beta}(\tau') \rangle + \Theta(\tau' - \tau) \langle X_{\mathbf{r}'}^{\beta}(\tau') X_{\mathbf{r}}^{\alpha}(\tau) \rangle. \quad (2)$$

Для вычисления одночастичной функции Грина используем простейшее однопетлевое приближение самосогласованного поля. В этом приближении компоненты Фурье одночастичной функции Грина  $D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$  только множителями  $f_{\beta}$  отличаются от так называемой виртуальной функции Грина  $G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$ , которая, в свою очередь, удовлетворяет уравнению типа Дайсона:

$$D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) f_{\beta}, \quad \left\{ \hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right\}_{\beta}^{\alpha} = \{i\omega - \epsilon_m + \epsilon_s\} \delta(\alpha + \beta) - \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}). \quad (3)$$

Здесь  $(\epsilon_m - \epsilon_s)$  — энергия перехода, отвечающая номеру перехода  $\alpha$ ,  $\omega = T(2n + 1)\pi$ .

При заданных номерах одночастичного перехода  $\beta(m, s)$  каждый концевой множитель  $f_{\beta}$  по определению равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояний [3]. С другой стороны, в нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведения концевого множителя на обобщенную матрицу перескоков и однопетлевой поправки, которая не зависит ни от частоты, ни от импульса:

$$f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m, \quad \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_{\alpha} t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) + \Sigma^{\alpha,\beta}, \quad t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) = g_{\alpha}^{k,\sigma} t_s^k(\mathbf{p}) g_{\beta}^{s,\sigma}. \quad (4)$$

Средние значения для чисел заполнения  $n_{N+1}^m$  конечных состояний  $m$  находим через диагональную компоненту при  $\beta = -\alpha$ :

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow +0} D^{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau + \delta) &= \\ &= \lim_{\delta \rightarrow +0} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) \exp(i\omega\delta) = \\ &= \langle X_{\mathbf{r}}^{\beta(m,s)} X_{\mathbf{r}}^{\alpha(s,m)} \rangle = \langle X_{\mathbf{r}}^{m,s} X_{\mathbf{r}}^{s,m} \rangle = \\ &= \langle X_{\mathbf{r}}^{m,m} \rangle = n_{N+1}^m. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (4) определяют все концевые множители  $f(\alpha(s, m)) = n_s + n_m$ , которые входят в определение диагональных компонент одночастичной функции Грина, которая, в свою очередь, выражается через всевозможные концевые множители.

В однопетлевом приближении собственно-энергетические части не зависят ни от импульса, ни

от частоты. В используемых ниже упрощенных вычислениях они оказываются диагональными по номеру перехода:  $\Sigma^{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha,\beta} \Sigma_{\alpha}$ . Если ограничиться переходами между высокоспиновыми  $N$ - и  $(N + 1)$ -дырочными состояниями, вместо индексов « $\alpha$ » и « $\beta$ » удобно использовать величину проекции спина  $(N + 1)$ -дырочного состояния со спином  $S = (N + 1)/2$  (см., например, [4]). При этом квадраты генеалогических коэффициентов определяются через величину спина  $S$  и его проекцию  $M$ :

$$|g_S(M)| = \sqrt{\frac{S + M}{2S}}, \quad (6)$$

$$M = S, S - 1, S - 2, \dots, -S.$$

Фигурирующие в выражении для функции Грина (2) средние числа заполнения также определяются через величину полного спина и его проекцию. При включении магнитного поля происходит расщепление энергетических уровней, которое определяет поправки к средним числам заполнения.

Связь между вариациями  $N$ - и  $(N \pm 1)$ -частичных состояний удается выразить через среднее значение диагональной компоненты функции Грина при нулевом значении магнитного поля:

$$K = \frac{T}{g^2} \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha} G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) g_{\beta} f_{\beta} \exp(i\omega\delta), \quad (7)$$

$$g^2 = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2.$$

Чтобы получить уравнения для нахождения концевых множителей проведем усреднение  $T$ -произведения оператора уничтожения (1) на линейную комбинацию из сопряженных  $X$ -операторов с произвольными коэффициентами  $\gamma_{\alpha}^{m,\sigma}$ :

$$\begin{aligned} \hat{Y}_{(m,\sigma)} &= \sum_{\beta} \gamma_{\beta}^{m,\sigma} \hat{X}_{(m,\sigma)}^{\beta} \times \\ &\times \left\langle \hat{T} \left( \hat{a}_{(n,\sigma)}(\mathbf{r}, \tau) \hat{Y}_{(m,\sigma)}(\mathbf{r}', \tau') \right) \right\rangle = \\ &= \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha}^{n,\sigma} \gamma_{\beta}^{m,\sigma} \left\langle \hat{T} \left( \hat{X}_{\mathbf{r},\tau}^{\alpha} \hat{X}_{\mathbf{r},\tau'}^{\beta} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь использовано разложение оператора уничтожения (1) с помощью известных генеалогических коэффициентов  $g_{\beta}^{n,\sigma}$ . После перехода к пределу  $\tau' \rightarrow \tau$ ,  $\tau' > \tau$  получаем уравнения для нахождения всех  $(N + 1)$ -частичных чисел заполнения  $n_{N+1}^s$ :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} g_{\alpha(m,s)}^{(k,\sigma)} n_{N+1}^s \gamma_{\alpha(s,m)}^{(k,\sigma)} &= \\ &= T \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha(m,s)}^{(k,\sigma)} D_{\omega}^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) \gamma_{\beta(s,m)}^{(k,\sigma)} \times \\ &\quad \times \exp(i\omega\delta). \end{aligned} \quad (9)$$

Подставим в эти уравнения выражение (3) для функции Грина:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} g_{\alpha(m,s)}^{(k,\sigma)} n_{N+1}^s \gamma_{\alpha(s,m)}^{(k,\sigma)} &= T \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha(m,s)}^{(k,\sigma)} \times \\ &\quad \times \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} G_{\omega}^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) \exp(i\omega\delta) f_{\beta} \gamma_{\beta(s,m)}^{(k,\sigma)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Проведем явное вычисление входящей в правую сторону суммы по левым индексам:

$$\sum_{\alpha} g_{\alpha(m,s)}^{(k,\sigma)} G_{\omega}^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) = W_{\omega}^{\beta}(\mathbf{p}). \quad (11)$$

Для этой цели используем упрощенное выражение для обратной функции Грина:

$$\left[ \hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right]_{\beta}^{\alpha} = (E_{\omega}^{\alpha, \sigma}) \delta_{\alpha, \beta} - g_{\alpha} f_{\alpha} t_{\mathbf{p}} g_{\beta}. \quad (12)$$

Для простоты вычислений считаем, что компоненты Фурье матрицы интегралов перескока  $t_{\mathbf{p}}$  не зависят от номеров конечных и начальных состояний для выделенной группы переходов. Это предположение приводит к ликвидации недиагональных по индексам « $\alpha$ » и « $\beta$ » компонент собственной энергии  $\Sigma_{\alpha}$ , которые в однопетлевом приближении не зависят ни от частоты, ни от квазиимпульса. Одночастичная энергия  $E_{\alpha}$  зависит от разности  $N$ -дырочных и  $(N+1)$ -дырочных состояний и оказывается равной сумме химического потенциала и величины спинового расщепления в заданном магнитном поле  $H$ :

$$\begin{aligned} E_{\omega}^{\alpha, \sigma} &= i\omega + \mu + \sigma H - \Sigma_{\alpha}, \\ \omega &= (2k+1)\pi T, \quad \sigma = \pm 1. \end{aligned} \quad (13)$$

Таким образом, нас интересует только спиновая зависимость от величины приложенного слабого магнитного поля, что соответствует дальнейшей возможности определить спиновую магнитную восприимчивость и исследовать возможность появления ферромагнитной неустойчивости.

Явное выражение для обратной функции Грина (12) позволяет определить искомую сумму по индексам « $\alpha$ » в формуле (11):

$$W_{\omega}^{\beta}(\mathbf{p}) = \frac{g_{\beta}}{E_{\omega}^{\beta, \sigma}} \left[ 1 - \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}^2 t_{\mathbf{p}} f_{\alpha}}{E_{\omega}^{\alpha, \sigma}} \right]^{-1}. \quad (14)$$

В результате находим явный вид уравнений (10):

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} g_{\beta} n_{N+1}^{\beta} \gamma_{\beta} &= T \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} \exp(i\omega\delta) \times \\ &\quad \times \sum_{\beta} \frac{g_{\beta} f_{\beta} \gamma_{\beta}}{E_{\omega}^{\beta, \sigma}} \left[ 1 - \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}^2 t_{\mathbf{p}} f_{\alpha}}{E_{\omega}^{\alpha, \sigma}} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Поскольку числовые коэффициенты  $\gamma_{\beta}$  произвольны, число независимых уравнений, содержащихся в соотношениях (15), при заданных значениях генеалогических коэффициентов  $g_{\beta}$  равно числу возможных значений  $\beta$ , которое равно числу различных переходов, определяемых исходным разложением (1).

В пределе  $H \rightarrow 0$  концевые множители и однопетлевые собственно-энергетические части оказываются не зависящими от номера перехода  $\beta$ , т. е.

$$\lim_{H \rightarrow 0} f_{\beta} = f_0, \quad \lim_{H \rightarrow 0} E_{\omega}^{\beta, \sigma} = i\omega + \mu_0.$$

Полагая в уравнениях (15)  $\gamma_{\beta} = g_{\beta}$  и переходя к пределу  $H \rightarrow 0$ , получаем уравнение для нахождения средних  $(N+1)$ -дырочных состояний:

$$\begin{aligned} n_{N+1} &= R_{1+N} f_0 K, \\ K &= T \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{\exp(i\omega\delta)}{[i\omega - \xi_{\mathbf{p}}]} = \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \end{aligned} \quad (16)$$

где  $R_{N+1}$  — кратность  $(N+1)$ -дырочного состояния в отсутствие магнитного поля,  $n_F(\epsilon)$  — распределение Ферми,  $\xi_{\mathbf{p}} = (g^2 f_0 t_{\mathbf{p}} - \mu_0)$  — энергия одночастичных возбуждений,  $g^2$  — полная сумма квадратов генеалогических коэффициентов с учетом кратности вырождения выделенной группы переходов  $g^2 = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2$ .

Поскольку в отсутствие поля концевой множитель равен сумме чисел заполнения  $N$ - и  $(N+1)$ -дырочных состояний, полное число дырок выражается через интегральную функцию  $K$  с помощью следующего уравнения:

$$\begin{aligned} n &= [n] + R_{1+N} f K, \quad f_0 = \frac{1 + [n] - n}{R_N} + \frac{n - [n]}{R_{N+1}}, \\ &\quad [n] \leq n < [n] + 1. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь квадратные скобки обозначают целую часть, а второе соотношение может быть записано с учетом того, что в используемом приближении концевой множитель есть линейная функция от чисел заполнения.

Система уравнений (16), (17) определяет связь между химическим потенциалом, температурой и плотностью  $n$  дырок. Для удобства вычислений

можно ввести перенормированный химический потенциал и перенормированную температуру:

$$\mu_0 = \tilde{\mu}_0 f_0 g^2, \quad T = \tilde{T} f_0 g^2, \quad (18)$$

тогда интегральная функция  $K$  будет зависеть от  $\tilde{T}$  и  $\tilde{\mu}$ , как если бы эти переменные являлись температурой и химическим потенциалом идеального газа. Далее с помощью уравнений (17) находим зависимость от этих параметров для конечного множителя  $f_0$  и среднего числа  $n$  дырочных состояний, после чего с помощью (18) определим истинную температуру и химический потенциал.

Для нахождения температурной и концентрационной зависимостей спиновой магнитной восприимчивости положим в уравнениях  $\gamma_\beta = g_\beta$  для тех переходов, которые различаются величиной проекции полного спина в конечном  $(N + 1)$ -дырочном состоянии. Для остальных переходов с той же конечной проекцией спина положим  $\gamma_\beta = 0$ , а затем проведем варьирование правой части уравнения (15) по величине магнитного поля, по величине конечных множителей, а также по однопетлевым собственнo-энергетическим частям:

$$\sum_{k=-S+1}^S g_k^2 \delta n_{N+1}^{(k)} = (K + g^2 f_0 D_1) \sum_{k=-S+1}^S g_k^2 \delta f_k + D_0 f_0 \sum_{k=-S+1}^S g_k^2 \delta \Sigma_k - b^2 f_0 D_0 \delta H. \quad (19)$$

Коэффициенты этого уравнения вычисляются при нулевом внешнем магнитном поле:

$$D_s = T \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^s \frac{\exp(i\omega\delta)}{[i\omega - \xi_{\mathbf{p}}]^2} = \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^s n'_F(\xi_{\mathbf{p}}). \quad (20)$$

Величина  $b^2 = \sum_k g_k^2$  — сумма квадратов генеалогических коэффициентов, относящихся к состояниям с заданной проекцией полного спина в конечном состоянии и фиксированной совокупности одночастичных орбитальных состояний. С помощью определения (6) находим

$$b^2 = \sum_{M=-S}^S \frac{S+M}{2S} = S + \frac{1}{2}. \quad (21)$$

Если рассматривать всевозможные одночастичные переходы к состояниям с заданным полным спином  $S$  высокоспиновых  $(N + 1)$ -дырочных состояний, то мы получим несколько групп переходов, для которых справедливо определение (6). В этом случае сумму квадратов генеалогических коэффициентов

$g^2$  при заданном полном спине  $S$  высокоспиновых  $(N + 1)$ -дырочных состояний и при заданном числе  $\kappa$  различных орбитальных состояний находим через комбинаторный множитель:

$$g^2 = b^2 C_{\kappa-1}^{2S-1} = b^2 \frac{(\kappa-1)!}{(2S-1)!(\kappa-2S)!}. \quad (22)$$

При заданном значении полного числа  $\kappa$  орбитальных компонент в общем случае следует рассмотреть различные значения полного спина: от  $S = 1/2$  до  $S = \kappa/2$ .

Остальные уравнения для вариации  $(N + 1)$ -дырочных состояний удобно записать с помощью вспомогательных коэффициентов  $\gamma_k$ , удовлетворяющих условию ортогональности к совокупности различных генеалогических коэффициентов:

$$\sum_{k=-S+1}^S g_k \gamma_k = 0. \quad (23)$$

Проводя варьирование уравнения (15) с учетом этих условий, получаем  $2S - 1$  возможных соотношений, которые не зависят от вариации магнитного поля:

$$\sum_{k=-S+1}^S g_k \gamma_k \delta n_{N+1}^{(k)} = K \sum_{k=-S+1}^S g_k \gamma_k \delta f_k + f_0 A \sum_{k=-S+1}^S g_k \gamma_k \delta \Sigma_k. \quad (24)$$

При этом появляется новый коэффициент, имеющий особенность при нулевой энергии возбуждений:

$$A = \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{p}}) - n_F(-\mu)}{\xi_{\mathbf{p}} + \mu}. \quad (25)$$

Поскольку в правую часть системы уравнений (20), (24) вариации средних чисел заполнения входят неявно только через вариации конечных множителей, к этим уравнениям необходимо присоединить соотношения, с помощью которых вариации средних чисел заполнения  $\delta n_{N+1}^k$  выражаются через вариации конечных множителей  $\delta f_k$ .

Эти соотношения нетрудно получить, если заметить, что при наложении внешнего магнитного поля вариации  $\delta n^k$  чисел заполнения, соответствующие заданной проекции спина  $k = S^z \neq 0$ , только знаком отличаются от вариаций чисел заполнения, относящихся к тому же состоянию, но с противоположной проекцией спина.

Учитывая связь между номером конечного множителя  $k = S^z$  и значениями проекции спина для  $N$ -

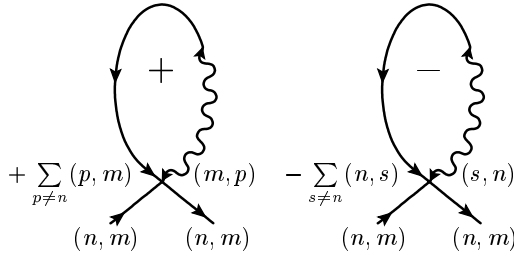


Рис. 1. Однопетлевые собственно-энергетические части

и  $(N + 1)$ -дырочных состояний  $f_k = n_{N+1}^{(k)} + n_N^{(k-1/2)}$ , сразу находим искомые соотношения:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1-S+p}^{S-p} \delta f_k &= \sum_{k=1-S+p}^{S-p} \delta n_{N+1}^{(k)} + \sum_{k=1-S+p}^{S-p} \delta n_N^{(k-1/2)} = \\ &= \sum_{k=1-S+p}^{S-p-1} \delta n_{N+1}^{(k)} + \delta n_{N+1}^{(S-p)} = \delta n_{N+1}^{(S-p)}. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь числа  $p$  могут принимать все целые значения от нуля до  $[S]$ , так что соотношения (26) полностью решают задачу об исключении из левой части уравнений (19), (24) вариации всех  $N + 1$ -дырочных чисел заполнения.

Для того чтобы получить уравнения для вариации собственно-энергетических частей  $\Sigma_\alpha$ , представим собственно-энергетическую часть в виде суммы двух слагаемых, каждое из которых содержит одночастичную функцию Грина, просуммированную по импульсам и частотам (см. рис. 1):

$$\Sigma_\alpha = A_{\alpha,\beta} Y_\beta^\sigma + B_{\alpha,\beta} Y_\beta^{-\sigma}, \quad (27)$$

где  $A_{\alpha,\beta}$  и  $B_{\alpha,\beta}$  — заданные числовые матрицы, определяемые матричными элементами кинематического взаимодействия, характерные для заданной группы спиновых состояний. Функции  $Y_\beta^\sigma$  выражаются через ту же сумму  $W_\omega^\alpha(\mathbf{p})$ , что и при вычислении чисел заполнения:

$$\begin{aligned} Y_\alpha^\sigma &= g_\alpha T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \sum_{\beta} g_\beta [G_\omega(\mathbf{p}, \sigma)]_\alpha^\beta = \\ &= g_\alpha T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} W_\omega^\alpha(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (28)$$

Подставляя сюда явное выражение (14), находим

$$Y_\alpha^\sigma = g_\alpha^2 T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{1}{E_\omega^{\alpha,\sigma}} \left[ 1 - \sum_{\nu} \frac{g_\nu^2 t_{\mathbf{p}} f_\nu^\sigma}{E_\omega^{\nu,\sigma}} \right]^{-1}. \quad (29)$$

При нулевом внешнем магнитном поле однопетлевые поправки не зависят от номера перехода, что

дает несущественную поправку к химическому потенциалу.

При вычислении вариации  $\Sigma$  по величине внешнего магнитного поля используем очевидное соотношение

$$\delta \Sigma_\alpha = A_{\alpha,\beta} \delta Y_\beta^\sigma - B_{\alpha,\beta} \delta Y_\beta^{-\sigma}. \quad (30)$$

Далее естественно ввести числовую матрицу

$$S_{\alpha,\beta} = A_{\alpha,\beta} g_\beta^2 - B_{\alpha,\beta} g_\beta^2, \quad (31)$$

через которую выражаются вариации правых частей соотношений (29) и (24):

$$\begin{aligned} \delta \Sigma_k &= g^2 \sum_{p=-S+1}^S D_{k,p}^{(2)} \delta f_p + \\ &+ \sum_{p=-S+1}^S [D_{k,p}^{(1)} - F_{k,p}] \delta \Sigma_p - R_k D_1 \delta H. \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь введены компоненты числового вектора  $R_k = \sum_{p=-S+1}^S S_{k,p}$ , через который выражаются все остальные матрицы:

$$\begin{aligned} D_{k,p}^{(n)} &= D_n U_{k,p}, \\ F_{k,p} &= Q W_{k,p}, \quad Q = \frac{[K - n(-\mu)]}{f_0 g^2}, \end{aligned} \quad (33)$$

здесь число  $g^2 = \sum_{\alpha} g_\alpha^2$  только множителем  $C_{\kappa-1}^{2S-1}$  отличается от  $b^2 = \sum_k b_k^2$ ,

$$U_{k,p} = \frac{R_k g_p^2}{b^2}, \quad b^2 = S + \frac{1}{2}, \quad W_{k,p} = U_{k,p} - S_{k,p}, \quad (34)$$

где  $S$  — величина спина  $(N + 1)$ -дырочных состояний,  $\kappa$  — полное число выделенных орбитальных состояний.

Таким образом, при заданных числах  $S_{k,p}$  и коэффициентах  $D_n, A, K, Q$  система уравнений (19), (24), (26) и (32) позволяет найти вариации всех конечных множителей и однопетлевых собственно-энергетических частей (рис. 1).

Чтобы определить спиновую восприимчивость  $\chi$ , необходимо найти поправки к спиновому магнитному моменту:

$$\begin{aligned} \chi &= 2\kappa \frac{\mu_B^2}{v_0} \frac{\delta M}{\delta H}, \\ \delta M &= \sum_{k=-S}^S k \delta n_{N+1}^{(k)} + \sum_{m=-S+1/2}^{S-1/2} m \delta n_N^{(m)}, \end{aligned} \quad (35)$$

$v_0$  — объем элементарной ячейки,

Линейная комбинация вариаций чисел заполнения, входящая в определение вариации спинового момента, должна быть выражена через вариации концевых множителей, которые находим из системы уравнений (19), (24), (26) и (32).

Для получения соответствующего соотношения сначала вычислим вспомогательную сумму, исходя из определения концевых множителей (6):

$$\begin{aligned} \sum_{k=-S+1}^S k \delta f_k &= \sum_{k=-S+1}^S k \delta n_{N+1}^{(k)} + \\ + \sum_{k=-S+1}^S k \delta n_N^{(k-1/2)} &= \sum_{k=-S}^S k \delta n_{N+1}^{(k)} + S \delta n_{N+1}^{(-S)} + \\ &+ \sum_{k=-S+1}^S \left(k - \frac{1}{2}\right) \delta n_N^{(k-1/2)} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=-S+1}^S \delta n_N^{(k-1/2)}. \end{aligned} \quad (36)$$

Последняя сумма обращается в нуль, поскольку в ней суммирование распространяется по всем возможным проекциям полного спина, относящегося к  $N$ -дырочным состояниям. Первая и третья суммы — поправка к спиновому моменту, а второе слагаемое преобразуется в сумму по вариациям концевых множителей с помощью формулы (26) при  $p = 0$ :

$$S \delta n_N^{(-S)} = -S \delta n_N^{(S)} = -S \sum_{k=1-S}^S \delta f_k. \quad (37)$$

В результате выражаем вариацию спинового момента через вариации концевых множителей:

$$\begin{aligned} \delta M &= \sum_{k=1-S}^S (S+k) \delta f_k = \sum_{p=1}^{2S} p \delta \tilde{f}_{2S+1-p} = \\ &= \sum_{n=1}^{2S} (2S+1-n) \delta \tilde{f}_n. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь и ниже использована иная нумерация концевых множителей:  $\tilde{f}_n = f_{S+1-n}$ ,  $n = 1, 2, \dots, 2S$ .

Соотношения (26), (35) и (38) позволяют в качестве переменных использовать только концевые множители и их вариации, а затем определить восприимчивость как функцию перенормированной температуры и химического потенциала (см. (18)).

Для нахождения условий ферромагнитной неустойчивости достаточно записать условия разрешимости однородной системы уравнений, полученной из уравнений (19), (24), (26) и (32) при  $\delta H = 0$ .

В результате находим соотношение между перенормированной температурой и химическим потенциалом, из которого можно получить магнитную фазовую диаграмму в переменных «концентрация–температура».

### 3. ФЕРРОМАГНЕТИЗМ НИКЕЛЯ

В случае Ni, Pd и Pt  $d$ -система резонирует между пустыми (десятиэлектронными) и однодырочными (девятиэлектронными) состояниями.

Рассмотрим предельный случай, когда влиянием кристаллического поля можно пренебречь по сравнению с шириной дырочной зоны проводимости. При нулевом магнитном поле и бесконечной энергии Хаббарда получаем, согласно (17), следующее уравнение состояния:

$$\begin{aligned} h_d &= 2\kappa f \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad \xi_{\mathbf{p}} = ft_{\mathbf{p}} - \mu, \\ f &= 1 - \frac{h_d(2\kappa - 1)}{2\kappa}. \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь  $\kappa = 5$  — полное число орбитальных однодырочных состояний,  $f$  — концевой множитель, который при нулевом магнитном поле есть линейная функция среднего числа дырок, приходящихся на одну ячейку  $n_h$ . Химический потенциал  $\mu$  включает в себя сумму всех однопетлевых собственно-энергетических частей, которые при нулевом магнитном поле не зависят ни от спиновых, ни от орбитальных индексов.

При конечном магнитном поле удобно выделить спиновую и орбитальную части и записать уравнение для среднего числа дырок, имеющих заданную величину проекции спина  $\sigma$  и одночастичного орбитального момента:

$$\begin{aligned} n_m^\sigma &= f_m^\sigma \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_m^\sigma(\mathbf{p})), \\ \xi_m^\sigma(\mathbf{p}) &= f_m^\sigma t_{\mathbf{p}} + \Sigma_m^\sigma - \mu - \sigma H - mH, \\ f_m^\sigma &= n_0 + n_m^\sigma. \end{aligned} \quad (40)$$

Здесь концевые множители равны сумме среднего числа пустых  $n_0$  и однодырочных  $n_m^\sigma$  состояний, так что их вариация, связанная с вариацией магнитного поля, совпадает с вариацией однодырочных состояний:  $\delta n_m^\sigma = \delta f_m^\sigma$ .

Уравнения для однопетлевых собственно-энергетических частей имеют весьма простой вид, поскольку для упрощения мы предполагаем, что спектр

энергетических возбуждений диагонален как по спиновым, так и по орбитальным индексам:

$$\Sigma_m^\sigma = -T \sum_{\mathbf{p}, k, \omega} t_{\mathbf{p}} \{G_{\omega}^{\sigma, k}(\mathbf{p}) + G_{\omega}^{-\sigma, k}(\mathbf{p})\} + T \sum_{\mathbf{p}, \omega} t_{\mathbf{p}} G_{\omega}^{\sigma, m}(\mathbf{p}). \quad (41)$$

Последнее слагаемое сокращается с первым слагаемым в первой сумме, что соответствует нулевой амплитуде рассеяния возбуждений с одинаковыми спиновыми и орбитальными индексами. В нашем представлении одночастичная функция Грина диагональна, так что суммирование по частоте  $\omega_n = \pi T(2n+1)$  приводит к известной функции Ферми:

$$\Sigma_m^\sigma = - \sum_{\mathbf{p}, k} t_{\mathbf{p}} \{n_F(\xi_k^\sigma(\mathbf{p})) + n_F(\xi_k^{-\sigma}(\mathbf{p}))\} + \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} n_F(\xi_m^\sigma(\mathbf{p})). \quad (42)$$

Для нахождения условий возникновения ферромагнитной неустойчивости достаточно определить условия появления ненулевых вариаций средних чисел заполнения  $\delta n_m^\sigma$  при нулевой вариации величины магнитного поля  $H$ . Предположим, что вариации не зависят от орбитальной переменной  $m$ , но меняют знак при изменении знака проекции спина:

$$\delta n_m^\sigma = -\delta n_m^{-\sigma} = \delta f^\sigma = -\delta f^{-\sigma}. \quad (43)$$

Независимость вариации от орбитальных индексов соответствует возможности разделения восприимчивости на спиновую и орбитальную части и дальнейшего выделения сингулярной части спиновой восприимчивости. Удастся доказать, что орбитальная неустойчивость в кубической решетке не возникает, так что ниже зависимость от орбитальных индексов не рассматривается.

Вариация уравнений (40) и (41) приводит к следующим уравнениям:

$$\begin{pmatrix} 1 - K - fD_1 & -fD_0 \\ -D_2 & 1 - D_1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \delta f^\sigma \\ \delta \Sigma^\sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -fD_0 \sigma \delta H \\ -D_1 \sigma \delta H \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Все коэффициенты определяются через затравочную плотность состояний  $\rho_0(\epsilon)$ :

$$\begin{aligned} K &= \int \rho(\epsilon) n_F(f\epsilon - \mu) d\epsilon, \\ D_k &= \int \rho(\epsilon) \epsilon^k n_F'(f\epsilon - \mu) d\epsilon. \end{aligned} \quad (45)$$

Решение системы уравнений (44) позволяет определить восприимчивость:

$$\chi(T) = 2\kappa \frac{\mu_B^2}{v_s} \frac{\delta f^\sigma}{\delta H} = 2\kappa \frac{\mu_B^2}{v_s} \times \frac{-fD_0}{1 - K - fD_1 - (1 - K)D_1 - f(D_0D_2 - D_1^2)}, \quad (46)$$

здесь  $v_s$  — объем элементарной ячейки,  $\mu_B$  — магнетон Бора. Возникновение ферромагнитного упорядочения находим из условия возможности разрешения однородной системы уравнений (44) при  $\delta H = 0$ :

$$1 - K = (f + 1 - K)D_1 + f(D_0D_2 - D_1^2), \quad (47)$$

при  $T = 0$ :

$$1 - K = \frac{fD_1}{1 - D_1}. \quad (48)$$

Уравнение состояния, устанавливающее связь между химическим потенциалом, плотностью и температурой, также выражается через функцию  $K$  и параметр  $\kappa$ , обозначающий число орбитальных компонент:

$$n = 2\kappa fK, \quad f = 1 - n \left(1 - \frac{1}{2\kappa}\right), \quad (49)$$

где  $\kappa$  — степень орбитального вырождения.

В пределе  $T \rightarrow 0$  эти соотношения упрощаются:

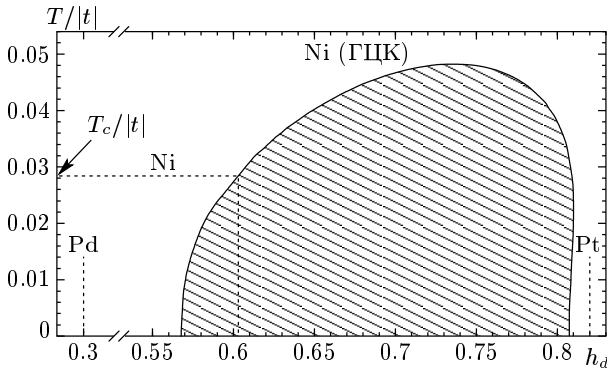
$$\begin{aligned} K &= \int_{-\infty}^{\nu} \rho(\epsilon) d\epsilon, \quad fD_1 = -\nu \rho(\nu), \\ f &= \frac{1}{1 + (2\kappa - 1)K}, \quad n = \frac{2\kappa K}{1 + (2\kappa - 1)K}. \end{aligned} \quad (50)$$

Поскольку все величины выражаются через единственный параметр  $\nu$ , после подстановки в условие ферромагнитной неустойчивости удастся определить критические значения, которым соответствует область существования ферромагнетизма при  $T = 0$ .

В модели полуэллиптической плотности состояний, когда  $\rho(\epsilon) = 2\sqrt{1 - \epsilon^2}/\pi$ , имеем следующее условие:

$$\begin{aligned} K &= \frac{\alpha - \sin \alpha}{2\pi}, \quad fD_1 = \frac{\sin \alpha}{\pi}, \\ \frac{1 - K}{-(2\kappa - 1)K^2 + (2\kappa - 2)K + 2} &= \frac{\sin \alpha}{\pi}. \end{aligned} \quad (51)$$

При заданной кратности вырождения  $\kappa$  последнее уравнение определяет критическую величину  $K_c$ ,



**Рис. 2.** Фазовая диаграмма никеля, палладия и платины. Ферромагнитная область заштрихована. Стрелкой отмечено теоретическое значение температуры перехода;  $T_c/|t| = (627.4 \cdot 2)/(3.78 \cdot 11606) = 0.0286$

которая соответствует критической концентрации  $n_c = 2\kappa K_c/[1 + (2\kappa - 1)K_c]$ .

При  $\kappa = 1, 2$  уравнения решений не имеют [5]. Если же  $\kappa = 5$ , то получаем две критические точки:  $K_{c1} = 0.1161$ , т. е.  $n_{c1} = 0.5671$ , и  $K_{c2} = 0.295$ , т. е.  $n_{c2} = 0.8071$ .

Таким образом, для модели полуэллиптической зоны ферромагнетизм существует в конечной области концентраций от  $n_{c1} = 0.56710$  до  $n_{c2} = 0.8071$  (см. рис. 2).

Наша теория качественно объясняет магнитные свойства металлов 8-й подгруппы — Ni, Pd и Pt. Все они имеют кубическую элементарную ячейку ГЦК-типа. Суммарное число электронов проводимости равно 10, а число электронов на незаполненной  $s$ -оболочке не превышает единицу. Согласно зонным расчетам число  $s$ -электронов на незаполненной оболочке составляет: 0.81, 0.59, 0.94 соответственно для Ni, Pd и Pt. Отсюда можно заключить, что число дырочных  $d$ -состояний ( $h_d$ ) равно соответственно 0.81, 0.59 и 0.94. Таким образом, число дырочных состояний никеля является промежуточным между  $h_d$  для палладия и платины. Естественно предположить, что Pd и Pt по своей концентрации дырок находятся вне области существования ферромагнитной неустойчивости, в то время как промежуточная величина дырочной концентрации Ni находится внутри области существования ферромагнитной неустойчивости (см. рис. 2, на котором можно видеть количественное согласие между экспериментальным и теоретическим значениями магнитного момента насыщения).

#### 4. ФЕРРОМАГНЕТИЗМ КОВАЛЬТА

Рассмотрим случай, когда система резонирует между однодырочными и двухдырочными высокоспиновыми состояниями со спином 1. Выразим вариацию двухдырочных чисел заполнения через вариации двух концевых множителей. В согласии с (26) получим

$$\delta n_{II}^\sigma = \sum_{k=1}^2 \delta f_k^\sigma, \quad \delta n_{II}^0 = 0. \quad (52)$$

Эти соотношения следует использовать для получения уравнений для вариации концевых множителей  $\delta f_k^\sigma$ :

$$b_1^2 \delta n_{II}^\sigma = \sum_{k=1}^2 \delta f_k^\sigma = (K + g^2 f D_1) \sum_{k=1}^2 b_k^2 \delta f_k^\sigma + f D_0 \sum_{k=1}^2 b_k^2 \delta \Sigma_k^\sigma - f D_0 b^2 \delta H. \quad (53)$$

Здесь необходимо использовать значения генеалогических коэффициентов (6) при  $S = 1$ , а также обозначения (22):

$$b_1^2 = 1, \quad b_2^2 = \frac{1}{2}, \quad \sum_{k=1}^2 b_k^2 = \frac{3}{2}, \quad g^2 = b^2(\kappa - 1), \quad (54)$$

что соответствует выбору максимально возможного числа вырожденных  $d$ -орбиталей ( $\kappa = 2, 3$  или  $\kappa = 5$ ).

Здесь и ниже

$$K = \sum_{\mathbf{P}} n_F(\xi_{\mathbf{P}}), \quad D_k = \sum_{\mathbf{P}} (t_{\mathbf{P}})^k n'_F(\xi_{\mathbf{P}}), \quad (55)$$

$$\xi_{\mathbf{P}} = g^2 f t_{\mathbf{P}} - \mu.$$

Два других уравнения запишем в согласии с (24) с использованием дополнительного условия ортогональности  $\gamma_1 b_1 = -\gamma_2 b_2$ :

$$b_1 \gamma_1 \delta n_{II}^\sigma = K \sum_{k=1}^2 b_k \gamma_k \delta f_k^\sigma + A \sum_{k=1}^2 b_k \gamma_k \delta \Sigma_k^\sigma. \quad (56)$$

Соотношения (52) позволяют исключить из уравнений вариации двухчастичных чисел заполнения, так что уравнения (53) и (56) переписываются следующим образом:

$$\delta f_1 + \delta f_2 = (K + g^2 f D_1) \sum_{k=1}^2 b_k^2 \delta f_k^\sigma + f D_0 \sum_{k=1}^2 b_k^2 \delta \Sigma_k^\sigma - f D_0 b^2 \delta H, \quad (57)$$



$$\delta f_1 + \delta f_2 = (\delta f_1 - \delta f_2)K + fA(\delta\Sigma_1^\sigma - \delta\Sigma_2^\sigma). \quad (58)$$

Здесь было использовано условие  $\gamma_1 b_1 = -\gamma_2 b_2$  и резонансный коэффициент  $A$ , определенный в (25).

Полученные уравнения при нулевых поправках к собственно-энергетическим частям  $\delta\Sigma$  определяют восприимчивость и границу ферромагнитной неустойчивости в нульпетлевом приближении:

$$K(1-K) - fg^2(1/3 + K)D_1. \quad (59)$$

Уравнения, связывающие между собой вариации чисел заполнения, содержат теперь также вариации собственно-энергетических частей (см. рис. 1).

При рассмотрении однопетлевых собственно-энергетических диаграмм можно заметить, что недиагональные по номерам перехода ( $k, p = 1, 2$ ) собственно-энергетические части обращаются в нуль, в то время как диагональные определяются через интегралы от функций Грина с заданной проекцией спина  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{(a,\sigma)} &= -(\kappa - 3)J_1^{(\sigma)} - (\kappa - 1)J_2^{(-\sigma)}, \\ \Sigma_2^{(a,\sigma)} &= -(\kappa - 1)J_1^{(-\sigma)} + 2J_2^{(-\sigma)} - (\kappa - 3)J_2^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (60)$$

Здесь  $\kappa$  — полное число орбитальных компонент; в нашем случае  $\kappa = 2$ ,  $\kappa = 3$  или  $\kappa = 5$ .

Величины, стоящие справа, не зависят от номера атомного состояния и при заданном  $\sigma$  различаются множителем, пропорциональным квадрату соответствующего генеалогического коэффициента  $g_1^2 = 1$  или  $g_2^2 = 1/2$ :

$$J_k^{(\sigma)} = T \sum_{n,\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^{(k,n)} G_{\omega}^{(n,k)} \propto g_k^2 C(\sigma). \quad (61)$$

В нулевом магнитном поле функции  $C(\sigma)$  не зависят от проекции спина, так что после их подстановки в (61) можно обнаружить, что в этом пределе обе собственно-энергетические части сводятся к постоянной, которая приводит к поправке к химическому потенциалу и ниже не учитывается.

Уравнения для  $\delta\Sigma$  получаем в согласии с общими соотношениями (31)–(34). Численные значения матрицы  $\hat{S}$ , построенной в соответствии с определением матрицы собственной энергии с помощью (60) и рис. 1, в данном случае имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \begin{pmatrix} 3 - \kappa & (\kappa - 1)/2 \\ \kappa - 1 & (1 - \kappa)/2 \end{pmatrix}, \\ \hat{R} &= \begin{pmatrix} (5 - \kappa)/2 \\ (\kappa - 1)/2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (62)$$

Матрица  $\hat{U}$  представляется в виде произведений  $U_{k,n} = R_k b_n / b^2$ :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} (5 - \kappa)/3 & (5 - \kappa)/6 \\ (\kappa - 1)/3 & (\kappa - 1)/6 \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Оператор  $\hat{F}^{(0)} = Q(\mu)\hat{W}$ , где  $Q$  определено в (33), а матрица  $\hat{W}$  имеет нулевую сумму элементов каждой строки:

$$\hat{W} = \hat{U} - \hat{S} = \begin{pmatrix} 2(\kappa - 2)/3 & 2(2 - \kappa)/3 \\ 2(-\kappa + 1)/3 & 2(\kappa - 1)/3 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Неоднородное слагаемое пропорционально двумерному вектору  $\hat{R}$ .

Запишем уравнения для поправок к конечным множителям для высокоспиновых  $3d$ -дырочных состояний, когда  $\kappa = 5$ :

$$\begin{pmatrix} 1 - b_1^2 P & 1 - b_2^2 P & -fD_0 b_1^2 & -fD_0 b_2^2 \\ 1 - K & 1 + K & -fA & fA \\ -g^2 D_2 K & -g^2 D_2 K & 1 - D_1 b_1^2 & 3/4 - D_1 b_2^2 \\ 0 & 0 & 1 + 2Q & -2Q \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \delta f_1 \\ \delta f_2 \\ \delta \Sigma_1 \\ \delta \Sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -fD_0 b^2 \delta H \\ 0 \\ -D_1 b^2 \delta H \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (65)$$

где

$$\begin{aligned} P &= K + g^2 f D_1, \quad f = \frac{1}{10(2K + 1)}, \\ g^2 &= 4b^2 = 6, \quad n_d = \frac{1 + 5K}{1 + 2K}. \end{aligned} \quad (66)$$

Приравнивая соответствующий определитель к нулю, получаем уравнение для нахождения условия ферромагнитной неустойчивости. При  $T = 0$ , когда выполняется условие  $D_2 D_0 - D_1^2 = 0$ , имеем уравнение

$$\begin{aligned} -\frac{4}{3}g^2 f A D_2 + K(1 - K)(3 + 14Q) &= \\ = \frac{1}{3}f g^2 D_1 (3K + 1)(3 + 14Q) &+ \\ + 2D_1(1 + 6Q)K(1 - K). \end{aligned} \quad (67)$$

Все коэффициенты зависят от положения химического потенциала.

Для модели полуэллиптической зоны все величины, входящие в уравнения, удобно выразить через параметр  $\alpha = \pi + 2 \arcsin(\mu/g^2 f)$ :

$$K = \frac{\alpha - \sin \alpha}{2\pi}, \quad D_0 = -\frac{2 \sin(\alpha/2)}{f \pi g^2},$$

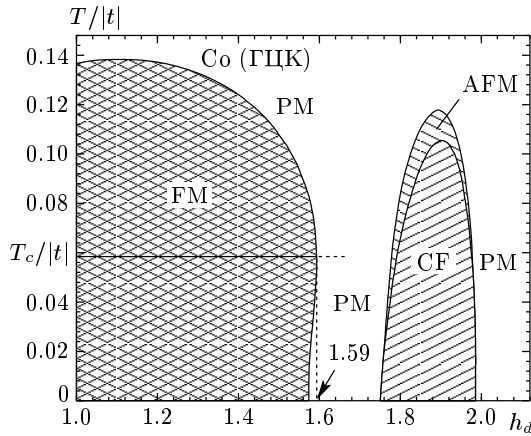


Рис. 3. Фазовая диаграмма кобальта: FM — ферромагнитные области, AFM — антиферромагнитные области, CF — смешанная фаза, PM — парамагнитные области;  $T_c/|t| = (1388 \cdot 2)/(4.35 \cdot 11606) = 0.05984$

$$D_1 = \frac{\sin \alpha}{f \pi g^2}, \quad D_2 = \frac{D_1^2}{D_0} = -\frac{\cos(\alpha/2) \sin \alpha}{f \pi g^2},$$

$$A(\mu) = \frac{2}{\pi f g^2} \left\{ \ln \left| \operatorname{tg} \left[ \frac{\pi - \alpha}{4} \right] \right| + \sin \frac{\alpha}{2} \right\},$$

$$Q(\mu) = \frac{K_0 - \theta(\alpha - \pi)}{f g^2}. \quad (68)$$

Возникающая в коэффициенте  $A(\mu)$  логарифмическая расходимость при  $\mu \rightarrow 0$  в выражении (67) компенсируется множителем  $D_2$ .

В согласии с общей формулой (38), поправка к магнитному моменту выражается через линейную комбинацию поправок к конечным множителям:

$$\delta M = 2\delta n_{II}^1 + \delta n_I^{1/2} = 2\delta f_1 + \delta f_2. \quad (69)$$

После вычисления последней суммы получим восприимчивость

$$\chi = \frac{2\kappa\mu_b^2}{v_0} \frac{[-fD_0(1+3K)(3+14Q) - 4AD_1]}{D}, \quad (70)$$

где величина, стоящая в знаменателе, имеет следующий вид:

$$D = -\frac{4}{3}g^2AD_2 + K(1-K)(3+14Q) - f g^2 D_1 \left( K + \frac{1}{3} \right) (14Q+3) - 2D_1(1+6Q)K(1-K) - 2f g^2 \left( \frac{1}{3} + K \right) (1+6Q)(D_2D_0 - D_1^2). \quad (71)$$

Численное решение уравнения (67) определяет область ферромагнитной неустойчивости (см. рис. 3):

$$1 < n_d < 1.5732. \quad (72)$$

В нуль-петлевом приближении мы находим менее широкую область ферромагнитной неустойчивости:  $1 < n_d < 1.3946$ .

Особые свойства фазовой диаграммы, проявляющиеся в области положительных значений химического потенциала, связаны с появлением функции  $A$ , которая при  $T = 0$  имеет логарифмическую особенность при нулевом значении химического потенциала (т.е. при  $\alpha = \pi$ ). Эта особенность компенсируется множителем  $D_2$ , который обращается в нуль именно в той же точке. Однако вне этой точки, а также при  $\alpha \neq 0, 2\pi$  произведение  $AD_2$  оказывается положительным. Это и есть причина, по которой система остается парамагнитной в широкой области концентраций, за исключением двух узких областей, которые примыкают к точкам, соответствующим критическим значениям  $\alpha = 0$  и  $\alpha = \pi$ .

Другой особенностью изучаемой системы является возможность изменения знака магнитной восприимчивости за счет обращения в нуль числителя ( $N$ ) магнитной восприимчивости, так что существует узкая область, внутри которой восприимчивость оказывается отрицательной. В пределе  $T = 0$  ширина левой части равна нулю, правая часть этой области имеет узкую, но конечную ширину:

$$1.995 < h_d < 1.999. \quad (73)$$

Со стороны высоких температур граница этой области определяется условием обращения в нуль величины магнитной восприимчивости. Со стороны низких температур граница определяется условием обращения восприимчивости в бесконечность. Отсюда можно заключить, что узкая область отрицательной восприимчивости отвечает антиферромагнитной фазе. Внутри этой области система, по-видимому, также является упорядоченной, так как она граничит с антиферрометаллической фазой, а на границе с ней восприимчивость обращается в бесконечность.

### 5. ФЕРРОМАГНЕТИЗМ ЖЕЛЕЗА

В этом случае система резонирует между двух- и трехдырочными высокоспиновыми состояниями. Соответственно этому запишем уравнения для находж-

дения трехдырочных чисел заполнения. В согласии с общими соотношениями (19) имеем

$$b_1^2 \delta n_{\text{III}}^{(3\sigma/2)} + b_2^2 \delta n_{\text{III}}^{(\sigma/2)} + b_3^2 \delta n_{\text{III}}^{(-\sigma/2)} = K_0 \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta f_k^\sigma + f \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta \Sigma_k^\sigma D_0 + b^2 f \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta f_k^\sigma D_1 - b^2 f \sigma \delta H D_0. \quad (74)$$

Здесь необходимо использовать численные значения генеалогических коэффициентов, полученные из (6), для переходов к трехдырочным состояниям со спином  $S = 3/2$ :

$$b_1^2 = 1, \quad b_2^2 = \frac{2}{3}, \quad b_3^2 = \frac{1}{3}, \\ b^2 = \sum_k b_k^2 = 2, \quad (75) \\ g^2 = b^2 C_{\kappa-4}^2 = (\kappa - 4)(\kappa - 3).$$

С помощью общих соотношений (26) вариации чисел заполнения выражаются через вариации конечных множителей:

$$\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} = \delta f_1 + \delta f_2 + \delta f_3, \quad \delta n_{\text{III}}^{(1/2)} = \delta f_2, \\ \delta n_{\text{II}} = -\delta f_2 - \delta f_3. \quad (76)$$

Два дополнительных соотношения находим с помощью условий ортогональности. Так, при условии  $b_3 \beta_3 = b_1 \beta_1$ ,  $b_2 \beta_2 = -2b_1 \beta_1$ , в согласии с (24), имеем следующее:

$$(1 - K)(\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} - 3\delta n_{\text{III}}^{(1/2)}) = f A(\mu) (\delta \Sigma_1 - 2\delta \Sigma_2 + \delta \Sigma_3). \quad (77)$$

Если же положить  $\beta_2 = 0$ ,  $b_3 \beta_3 = -b_1 \beta_1$ , то получим

$$(1 - K_0) (\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} + \delta n_{\text{III}}^{(1/2)}) - 2K_0 \delta n_{\text{II}} = f A(\mu) (\delta \Sigma_1 - \delta \Sigma_3). \quad (78)$$

Коэффициенты  $K$ ,  $D_k$ ,  $A$  определены теми же общими формулами, что и в предыдущем разделе.

Три уравнения для диагональных собственных-энергетических частей записываются в согласии с рис. 1 в виде

$$\Sigma_1^{(a,\sigma)} = 2J_1^{(\sigma)} - (\kappa - 3)J_1^{(\sigma)} - (\kappa - 2)J_3^{(-\sigma)}, \\ \Sigma_2^{(a,\sigma)} = 2J_2^{(\sigma)} - (\kappa - 2)J_2^{(-\sigma)} - (\kappa - 3)J_2^{(\sigma)} + 3J_3^{(-\sigma)}, \quad (79) \\ \Sigma_3^{(a,\sigma)} = -(\kappa - 2)J_1^{(-\sigma)} + 3J_2^{(-\sigma)} + 2J_3^{(\sigma)} - (\kappa - 3)J_3^{(\sigma)}.$$

Здесь  $J_s^{(\sigma)} = T \sum_{n,\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^{(s,n)} G_\omega^{(n,s)}(\mathbf{p})$  — сумма произведений матричных элементов матрицы перехода  $\hat{t}(\mathbf{p})$  на элементы матрицы виртуальной функции Грина  $\hat{G}_\omega(\mathbf{p})$ , относящейся к заданной проекции спина и заданному  $a$ -состоянию ( $a = xy, yz, zx, x^2 - y^2, 3z^2 - r^2$ ).

Нашей следующей задачей является вычисление поправок  $\delta \Sigma_k$ , пропорциональных первой степени магнитного поля.

Три вариации  $\delta \Sigma$  удовлетворяют общим уравнениям (32) с коэффициентами, выражающимися через элементы матрицы  $\hat{S}$ .

В свою очередь, матрицы  $\hat{S}$  и  $\hat{R}$  находим через коэффициенты, входящие в уравнения (79):

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 5 - \kappa & 0 & (\kappa - 2)/3 \\ 0 & 2 & -1 \\ \kappa - 2 & -2 & (5 - \kappa)/3 \end{pmatrix}, \quad (80) \\ \hat{R} = \begin{pmatrix} (13 - 2\kappa)/3 \\ 1 \\ (13 - 2\kappa)/3 \end{pmatrix}.$$

Для  $d$ -электронов  $\kappa = 3, 4$  или  $5$ . Матрица  $\hat{U}$  представляется в виде произведений  $U_{k,n} = R_k b_n^2/2$ :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} (13-2\kappa)/6 & (13-2\kappa)/9 & (13-2\kappa)/18 \\ 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ (13-2\kappa)/6 & (13-2\kappa)/9 & (13-2\kappa)/18 \end{pmatrix}. \quad (81)$$

Оператор  $\hat{F}^{(0)} = Q(\mu)\hat{W}$ , где величина  $Q$  определена в (33), а матрица  $\hat{W} = \hat{U} - \hat{S}$  имеет нулевую сумму элементов каждой строки:

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} (4\kappa-17)/6 & (13-2\kappa)/9 & (25-8\kappa)/18 \\ 1/2 & -5/3 & 7/6 \\ (5-4\kappa)/6 & (2\kappa+11)/9 & (8\kappa-37)/18 \end{pmatrix}. \quad (82)$$

В частном случае  $\kappa = 5$  необходимо решать следующую систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} 1-(K_0+fg^2D_1) & 4/3-2(K_0+fg^2D_1)/3 & 1-(K_0+fg^2D_1)/3 & -fD_0 & -2fD_0/3 & -fD_0/3 \\ 1-K_0 & -2(1-K_0) & 1-K_0 & -fA & 2fA & -fA \\ 1-K_0 & 2 & 1+K_0 & -fA & 0 & fA \\ -g^2D_2/2 & -g^2D_2/3 & -g^2D_2/6 & Q/2-D_1/2+1 & Q/3-D_1/3 & -5Q/6-D_1/6 \\ -g^2D_2/2 & -g^2D_2/3 & -g^2D_2/6 & Q/2-D_1/2 & -5Q/3-D_1/3+1 & 7Q/6-D_1/6 \\ -g^2D_2/2 & -g^2D_2/3 & -g^2D_2/6 & -5Q/6-D_1/2 & 7Q/3-D_1/3 & Q/6-D_1/6+1 \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \delta f_1 \\ \delta f_2 \\ \delta f_3 \\ \delta \Sigma_1 \\ \delta \Sigma_2 \\ \delta \Sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b^2 f \sigma \delta H D_0 \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma \delta H D_1 \\ -\sigma \delta H D_1 \\ -\sigma \delta H D_1 \end{pmatrix}. \quad (83)$$

Коэффициенты, входящие в эту систему уравнений, выражаются через интегралы от распределения Ферми и зависят от перенормированной температуры и химического потенциала:

$$\tilde{T} = \frac{T}{fg^2}, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{fg^2}, \quad f = \frac{(6-h_d)}{120}, \quad (84)$$

$$g^2 = 12, \quad K = 3 \frac{(h_d-2)}{(6-h_d)}.$$

Приравняв нулю определитель этой системы, находим условие возникновения ферромагнитной неустойчивости:

$$K(1-K) = g^2 f D_1 \left( \frac{2}{3} + K \right) + K(1-K)D_1 +$$

$$+ fg^2 \left( \frac{2}{3} + K \right) (D_2 D_0 - D_1^2), \quad (85)$$

к которому необходимо добавить уравнение состояния в виде

$$fg^2 = \frac{6}{15+5K}, \quad h_d = 6 \frac{1+K}{3+K}, \quad 2 < h_d < 3.$$

Если  $T = 0$ , то  $D_2 D_0 = D_1^2$  и для модели полуэллиптической зоны все величины, входящие в уравнения, представляются в виде общих соотношений (68), зависящих от одного параметра  $\alpha$ , через который выражается полное число дырок  $h_d$ .

В результате получим фазовую диаграмму, изображенную на рис. 4.

Численное решение уравнения (84) дает  $\alpha_c = 2.6938$ ,  $K_c = 0.35826$ , так что ферромагнитная неустойчивость существует в ограниченной области

концентраций:  $2 < h_d < h_c = 2.4298$ . Вне этого интервала состояние оказывается парамагнитным [6].

В нуль-петлевом приближении также можно получить конечный интервал концентраций, внутри которого возникает ферромагнитная неустойчивость:  $2 < h_d < h_{c0} = 2.339$ .

Таким образом, ферромагнетизм существует во всей области от  $h_d = 2$  до  $h_d = 2.428$ . Однако, начиная с  $h_d = 2.26$  и до  $h_d = 2.428$  неустойчивость, связанная с чисто однопетлевыми поправками, исчезает и остается неустойчивость, которая определяется, в основном, нуль-петлевыми поправками.

Полученный результат имеет отношение к ферромагнетизму объемно-центрированного  $\alpha$ -железа, которое имеет магнитный момент насыщения равный  $2.2\mu_B$  (см., например, [7]).

Что же касается неферромагнитной фазы  $\gamma$ -железа, то, согласно измерениям, число электронов на  $d$ -оболочке составляет примерно 7.5, так что число дырок равно 2.5.

Таким образом, существование ферромагнетизма  $\alpha$ -железа объясняется тем, что число дырочных состояний (примерно 2.2) находится внутри интервала существования ферромагнитной неустойчивости. Отсутствие ферромагнетизма  $\gamma$ -железа объясняется тем, что количество дырок на  $3d$ -оболочке, равное примерно 2.5, превышает критическое значение, полученное как в нульпетлевом, так и в однопетлевом приближениях.

Качественный вывод о возможности существования ферромагнитного упорядочения на ограниченном интервале концентраций согласуется как с нульпетлевым, так и с однопетлевым приближенным вычислениями.

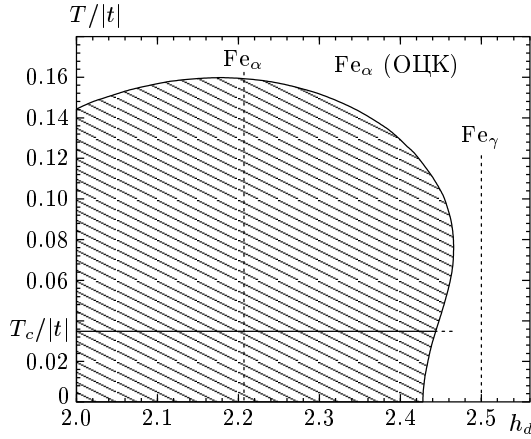


Рис. 4. Фазовая диаграмма железа. Ферромагнитная область заштрихована;  $T_c/|t| = (1044 \cdot 2)/(4.82 \cdot 11606) = 0.0373$

Для нахождения магнитной проницаемости достаточно вычислить поправку к величине магнитного момента  $\delta m$ , которая выражается в виде линейной комбинации вариаций конечных множителей (в согласии с (38)):

$$\delta m = 2 \left\{ \frac{3}{2} \delta n_{III}^{(3/2)} + \frac{1}{2} \delta n_{III}^{(1/2)} + \delta n_{II}^{(1)} \right\} = \delta f_3 + 2\delta f_2 + 3\delta f_1.$$

Вычисляя эту комбинацию с помощью системы уравнений (83), находим восприимчивость

$$\chi = \frac{\mu_B^2 2\kappa}{v_0} \frac{\delta m}{\delta H} = 2\kappa \mu_B^2 \frac{-2fD_0(3K+2)}{v_0 D}, \quad (86)$$

где  $v_0$  — объем элементарной ячейки,  $\mu_B$  — магнетон Бора,

$$D = K(1-K) - g^2 f D_1 \left( \frac{2}{3} + K \right) - K(1-K) D_1 - f g^2 \left( \frac{2}{3} + K \right) (D_2 D_0 - D_1^2). \quad (87)$$

Таким образом, удастся определить обратную магнитную восприимчивость, относящуюся к парамагнитной части фазовой диаграммы (см. рис. 4).

В данном случае резонансный коэффициент  $A$  выпадает из окончательной формулы (86), а числитель магнитной восприимчивости оказывается положительным при любых значениях температуры и химического потенциала.

### 6. ОБЛАСТЬ $3 < h_d < 4$

Этой области соответствует кубическая фаза парамагнитного марганца, который с понижением температуры переходит в антиферромагнитное состояние. Несмотря на это, рассмотрение данного интервала представляет интерес, поскольку соединения, содержащие катионы марганца, проявляют высокоспиновый ферромагнетизм.

Для изучения переходов между высокоспиновыми трех- и четырехдырочными состояниями используем общие соотношения (6) и (21):

$$b_1^2 = 1, \quad b_2^2 = \frac{3}{4}, \quad b_3^2 = \frac{1}{2}, \quad b_4^2 = \frac{1}{4}, \quad (88)$$

$$b^2 = \sum_{k=1}^4 b_k^2 = \frac{5}{2}, \quad g^2 = b^2 C_{\kappa-1}^3 = 10,$$

что соответствует выбору максимально возможного числа вырожденных  $d$ -орбиталей ( $\kappa = 5$ ).

Дальнейшее рассмотрение соответствует общим соотношениям, приведенным в разд. 2. Формула для восприимчивости имеет следующий вид:

$$\chi = 2\kappa \times 10 \frac{-fD_0(1+K) + AD_1}{v_0 D}, \quad (89)$$

где величина, стоящая в знаменателе, выражается через коэффициенты, вычисленные для парамагнитной фазы:

$$D = K(1-K) + g^2 D_2 A - f g^2 (K+1) D_1 - \frac{1}{2} (2Q+3) K(1-K) D_1 - \frac{1}{2} g^2 f (1+K) (2Q+3) (D_2 D_0 - D_1^2). \quad (90)$$

В пределе  $T = 0$ , когда  $D_1^2 - D_2 D_0 = 0$ , находим условие возникновения ферромагнетизма:

$$2K(1-K) + 2g^2 D_2 A = [2f g^2 (K+1) + (3+2Q)K(1-K)] D_1. \quad (91)$$

К этим уравнениям необходимо добавить уравнение состояния

$$\frac{1}{f} = 5(8-3n_d), \quad g^2 = 10, \quad n_d = 4 \frac{6-K_0}{8-3K_0}. \quad (92)$$

Численное решение уравнения (91) определяет достаточно широкую область ферромагнитной неустойчивости:  $3 < n_d < 3.318$ . В нуль-петлевом приближении находим менее широкую область ферромагнитной неустойчивости:  $3 < n_d < 3.23497$ .

Вычисление коэффициентов при конечной температуре позволяет определить температуру Кюри во всем интервале концентраций, где возможно существование ферромагнетизма (см. рис. 5).

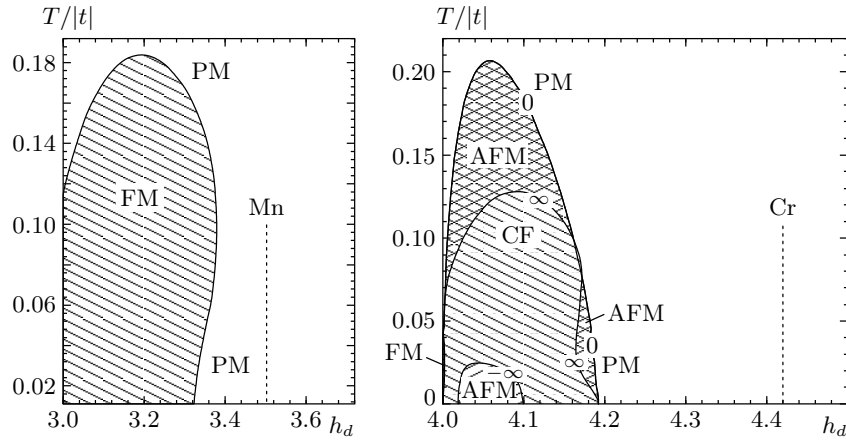


Рис. 5. Фазовая диаграмма высокоспиновых марганца и хрома: FM — ферромагнитные области, AFM — антиферромагнитные области, CF — смешанная фаза, PM — парамагнитные области

### 7. ОБЛАСТЬ $4 < h_d < 5$

Рассмотрение проводится по той же схеме, что и для марганца.

Сначала выразим вариации средних чисел заполнения  $\delta n_V^{(5\sigma/2)}$ ,  $\delta n_V^{(3\sigma/2)}$  и  $\delta n_V^{(\sigma/2)}$  через вариации пяти конечных множителей:

$$\delta n_V^{(5\sigma/2)} = \sum_{k=1}^5 \delta f_k^\sigma, \quad \delta n_V^{(3\sigma/2)} = \sum_{k=2}^4 \delta f_k^\sigma, \quad (93)$$

$$\delta n_V^{(\sigma/2)} = \delta f_3^\sigma.$$

Эти выражения следует подставить в уравнения для вариаций конечных множителей  $\delta f_k^\sigma$ .

Далее с помощью (6) и (21) вычисляем генеалогические коэффициенты:

$$b_1^2 = 1, \quad b_2^2 = \frac{4}{5}, \quad b_3^2 = \frac{3}{5}, \quad b_4^2 = \frac{2}{5},$$

$$b_5^2 = \frac{1}{5}, \quad b^2 = \sum_{k=1}^5 b_k^2 = 3, \quad g^2 = b^2, \quad (94)$$

что соответствует выбору максимально возможного числа вырожденных  $d$ -орбиталей ( $\kappa = 5$ ).

Поправка к магнитному моменту выражается с помощью (38) через линейную комбинацию поправок к конечным множителям:

$$\delta M =$$

$$= 2 \left( \frac{5}{2} \delta n_V^{(5\sigma/2)} + \frac{3}{2} \delta n_V^{(3\sigma/2)} + \frac{1}{2} \delta n_V^{(\sigma/2)} + 2\delta n_{IV}^{(2)} + \delta n_{IV}^{(1)} \right) =$$

$$= 5\delta f_1 + 4\delta f_2 + 3\delta f_3 + 2\delta f_4 + \delta f_5. \quad (95)$$

После вычисления последней суммы получим восприимчивость

$$\chi = 2\kappa \frac{\mu_B^2}{v_0} \times$$

$$\times \frac{[-5fD_0(3K+4)(15-26Q) + 80AD_1(7+2K)]}{D}, \quad (96)$$

где величина, стоящая в знаменателе, имеет следующий вид:

$$D = (15 - 26Q)K(1 - K) + \frac{112}{3}g^2D_2A -$$

$$- (31 + 6Q)K(1 - K)D_1 -$$

$$- \frac{1}{3}g^2f(3K + 4)(31 + 6Q)(D_2D_0 - D_1^2) +$$

$$+ \frac{1}{3}fg^2(3K + 4)(15 - 26Q)D_1. \quad (97)$$

Для нахождения фазовой диаграммы в зависимости от концентрации дырок к этим соотношениям необходимо добавить уравнение состояния

$$f = \frac{1}{25 - 19K}, \quad n = 10 \frac{10 - 7K}{25 - 19K}, \quad (98)$$

$$K = 25 \frac{n - 4}{19n - 70}.$$

В пределе  $T = 0$ , когда  $D_1^2 - D_2D_0 = 0$ , условие возникновения ферромагнетизма имеет следующий вид:

$$3(15 - 26Q)K(1 - K) + 112g^2D_2A =$$

$$= [fg^2(3K + 4)(15 - 26Q) +$$

$$+ 3(31 + 6Q)K(1 - K)]D_1. \quad (99)$$

Численное решение уравнения (99) определяет весьма узкую область ферромагнитной неустойчивости:  $4 < n_d < 4.0008829$ . В нуль-петлевом приближении мы получили бы широкую область ферромагнитной неустойчивости:  $4 < n_d < 4.23$ .

Существенное различие между фазовыми диаграммами хрома и марганца связано с появлением функции  $A$ . Как уже отмечалось, при  $T = 0$  она имеет логарифмическую особенность при нулевом значении химического потенциала (т. е. при  $\alpha = \pi$ ). Эта особенность компенсируется множителями  $D_1$  и  $D_2$ , которые обращаются в нуль именно в этой точке. Вне этой точки произведение  $AD_2$  всюду положительно, но не слишком велико, однако в области  $4 < h_d < 5$  оно умножится на большой численный множитель 112.

Другой особенностью изучаемой системы является возможность изменения знака магнитной восприимчивости за счет обращения в нуль числителя ( $N$ ) магнитной восприимчивости.

При  $T = 0$  можно обнаружить достаточно широкую область, внутри которой числитель оказывается отрицательным:  $4.00828829 < n_d < 4.1935$ .

Таким образом, при  $T = 0$  наряду с областями ферромагнитной (100) и антиферромагнитной неустойчивости,

$$\begin{aligned} 4 < n_d < 4.0008829, \\ 4.01782 < n_d < 4.098442, \\ D < 0, \quad N > 0, \end{aligned} \quad (100)$$

существуют области с положительной восприимчивостью (см. рис. 5), но с отрицательными числителем и знаменателем (здесь  $D < 0, N < 0$ ):

$$\begin{aligned} 4.008829 < n_d < 4.01782, \\ 4.098442 < n_d < 4.1935. \end{aligned} \quad (101)$$

При конечной температуре эта последняя область граничит с антиферромагнитной областью (см. рис. 5), причем на самой границе восприимчивость обращается в бесконечность. Отсюда можно сделать интуитивное заключение о том, что внутри этой области находится упорядоченная фаза смешанного типа.

Как следует из рис. 5, при понижении температуры система переходит не в ферромагнитное, а в антиферромагнитное состояние с отрицательной магнитной восприимчивостью.

При дальнейшем понижении температуры восприимчивость возрастает по абсолютной величине, обращается в бесконечность, а затем переходит в низкотемпературную фазу смешанного типа.

Причина этого явления состоит в наличии сильного взаимодействия антиферромагнитного типа, проявляющегося в виде резонансной функции  $A$ , которая при  $T = 0$  имеет логарифмическую особенность. Интенсивность этого взаимодействия зависит от величины полного спина в конечном и начальном состояниях. Оно отсутствует в случае нулевого начального спина для Ni, Pd и Pt. В случае кобальта оно входит с отрицательным знаком и поэтому проявляется только при большой энергии возбуждений в неферромагнитной области (см. рис. 3).

В случае высокоспиновых железа и марганца влияние резонанса несущественно. Однако в случае хрома область влияния резонанса перекрывается с областью ферромагнитной неустойчивости, что фактически приводит к ликвидации заметных областей ферромагнитного упорядочения.

## 8. ВЫВОДЫ

Наша теория качественно объясняет магнитные свойства металлов 8-й подгруппы Ni, Pd и Pt. Таким образом, число дырочных состояний никеля является промежуточным между  $h_d$  для палладия и платины. Естественно предположить, что Pd и Pt по своей концентрации дырок находятся вне области существования ферромагнитной неустойчивости, в то время как промежуточная величина дырочной концентрации Ni находится внутри области существования ферромагнитной неустойчивости (см. рис. 2).

При изучении фазовой диаграммы кобальта, железа и марганца мы обнаруживаем качественно иную ситуацию. В этих случаях система резонирует между высокоспиновыми (магнитными) состояниями, так что при малом числе возбуждений, когда амплитуда обменного рассеяния имеет отрицательный знак, система оказывается ферромагнитной. С повышением энергии Ферми происходит изменение знака амплитуды обменного рассеяния, так что для каждого целочисленного интервала дырочной концентрации система перестает быть ферромагнитной, начиная с некоторой критической концентрации.

Для кобальта наблюдаемое значение магнитного момента насыщения ( $1.7\mu_B$ ) несколько превышает критическое значение ( $1.59\mu_B$ ), полученное в настоящей работе.

Для ОЦК-железа, напротив, найденное критическое значение ( $2.46\mu_B$ ) превышает величину магнитного момента насыщения ( $2.2\mu_B$ ). Таким образом, наблюдаемое количество дырочных состояний принадлежит области ферромагнитного упорядочения.

Для неферромагнитной фазы  $\gamma$ -железа и марганца наблюдаемые (антиферромагнитные) значения момента превышают критические значения, вычисленные в настоящей работе.

Таким образом, предлагаемая модель дает возможность количественного описания ферромагнетизма никеля и  $\alpha$ -железа.

Кроме того, она дает возможность качественного объяснения причины отсутствия ферромагнетизма у палладия, платины,  $\gamma$ -железа, а также в гипотетических (высокоспиновых) фазах хрома и марганца.

Что же касается кобальта, то здесь необходимо дальнейшее уточнение модели, направленное на возможность ее применения к гексагональной фазе и ГЦК-фазе, с учетом конкретной одночастичной плотности состояний.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Hubbard and K. R. Jain, *J. Phys. C* **1**, 1650 (1968).
2. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
3. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **281** 401 (1964).
4. Д. Т. Смирнов, Ю. Ф. Смирнов, *Теория оптических спектров ионов переходных металлов*, Наука, Москва (1997).
5. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **112**, 2223 (1997).
6. Р. О. Зайцев, *Письма в ЖЭТФ* **68**, 275 (1998).
7. Д. Гуденаф, *Магнетизм и химическая связь*, Металлургия, Москва (1988).