ФТТ

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

ТОМ
21
1979

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

«НАУКА»
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

1979 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 21, в. 10
1979 SOLID STATE PHYSICS Vol. 21, № 10

СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ И ИХ УСТОЙЧИВОСТЬ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

В. Коллей, Е. Коллей, А. Л. Куземский

На основе микроскопической теории Ферми-жидкости при нулевой температуре вычислена энергия длинноволновых спиновых волн в ферромагнитных сплавах переходных металлов. В когерентном горизонтальном лестничном приближении для модели Хаббарда со случайными параметрами проведено самосогласованное вычисление ренормировки коэффициента спин-волновой жесткости D за счет электрон-электронных корреляций. Коэффициент D получен численным образом и используется для определения устойчивости ферромагнитного состояния. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов для сплавов на основе Ni.

В зонной теории ферромагнетизма коэффициент жесткости D характеризует длинноволновые спиновые волны типа $\omega_q = Dq^2$ ниже щели Стонера в спектре возбуждений частица—дырка. Данные по D, полученные из неупругого рассеяния нейтронов для чистого Ni [1] и сплавов на основе Ni (см., например, [2-5]), можно описать в рамках зонной модели ферромагнетизма. Подход, наиболее часто применяемый [6-10] для вычисления D для сплавов в рамках модели Хаббарда [11] со случайными параметрами, основан на приближении хаотических фаз (RPA), в котором электрон-электронное взаимодействие учитывается в приближении Хартри—Фока (HF), а разупорядочение — в приближении когерентного потенциала (CPA) [12]. Схема расцепления в RPA приведена в работе [13]. Помимо вычисления D в рамках CPA, имеются также расчеты для сплавов в модели «жесткой зоны» (см. [5, 10]).

Для учета эффектов корреляции электронов при вычислении D в [14] была предложена схема, выходящая за рамки RPA и основанная на когерентном лестничном приближении (CLA) [15, 16], т. е. на самосогласованной комбинации CPA и локального лестничного приближения [17] в канале частица—частица. Такое T-матричное приближение удобно использовать для сильных короткодействующих взаимодействий и малой плотности носителей, так что его можно применить к Ni, Pd и Pt. Если зависящую от энергии T-матрицу заменить эффективным взаимодействием типа Канамори [18], как это делалось, например, при вычислении парамагнитной восприимчивости [19] и магнитострикции [20], то снова приходим к теории спиновых волн в рамках RPA—CPA.

В настоящей статье, исходя из однозонной модели Хаббарда со случайными параметрами, мы найдем коэффициент D для неупорядоченных сплавов при нулевой температуре в рамках микроскопического Ферми-жидкостного подхода. Корреляционные эффекты вычисляются с сохранением энергетической зависимости T-матрицы. Численные результаты CLA по D сравниваются с экспериментальными данными для сплавов NiFe и NiPd. Кроме того, рассмотрена стабильность ферромагнетизма в рамках решений RPA—CPA.

1. Коэффициент жесткости с учетом электрон-электронных корреляций

Для описания ферромагнетизма в узкозонных сплавах A_cB_{1-c} достаточно воспользоваться гамильтонианом Хаббарда [11] со случайными параметрами

$$H^{\{\nu\}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i^{\nu} n_{i\sigma} + \sum_i U_i^{\nu} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{1}$$

где $n_{\mathbf{k}\sigma}$ ($n_{i\sigma}$) — оператор чисел заполнения для состояний Блоха (Ванье) со спином σ, а $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — зонная энергия, которая предполагается независимой от заданной конфигурации $\{\nu\}$ сплава. Одночастичный потенциал ε_i^{ν} и затравочное внутриатомное кулоновское взаимодействие U_i^{ν} принимают случайные значения ε^{ν} и U^{ν} (ν = A, B) в зависимости от того, заполнен ли узел i атомом A или B.

Энергию спиновых волн $\omega_q = Dq^2$ для кубических кристаллов можно определить по полюсу поперечной восприимчивости $\chi^{+-}(q, \omega)$, что приводит к следующему выражению для коэффициента жесткости

$$D = -\frac{1}{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c} \lim_{\omega\to 0} \lim_{q\to 0} \left[\frac{\omega^2}{q^2}\left(\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c}{\omega}\right)\right], \tag{2}$$

где $2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c = (n_\uparrow - n_\downarrow)$ — намагниченность на узел (n_σ — среднее число электронов на узел), $\langle\ldots\rangle^{\{\nu\}}$ — среднее по основному состоянию при заданной конфигурации $\{\nu\}$, а $\langle\ldots\rangle_c$ — среднее по конфигурациям. В работах [7, 10, 13] для сплавов была использована другая формула

$$D = \frac{1}{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c}\left[\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\langle\langle[S_{\mathbf{q}}^+, qJ_{-\mathbf{q}}^-]\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c - \lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}\chi_J^{+-}(\mathbf{q}, \omega)\right], \tag{3}$$

записанная в терминах функции отклика $\chi_J^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$ для спинового тока (ср. [21]). В случае модели (1) Фурье-образы оператора плотности поперечного спина $S_{\mathbf{q}}^+$ (или $S_{\mathbf{q}}^- = (S_{\mathbf{q}}^+)^+$) и оператора тока $J_{\mathbf{q}}^+$ (или $J_{-\mathbf{q}}^- = (J_{\mathbf{q}}^+)^+$), которые здесь не зависят от случайных параметров, имеют вид

$$\left.\begin{aligned} S_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \\ qJ_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\, c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

где $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии $|\mathbf{k}\sigma\rangle$, N — число узлов решетки.

Восприимчивости, входящие в формулы (2), (3), могут быть выражены (ср. [14]) с помощью (4) через причинные функции Грина при нулевой температуре следующим образом

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^-\rangle\rangle_\omega^{\{\nu\}}\rangle_c =$$
$$= \frac{i}{N}\int\frac{dE}{2\pi}\langle\mathrm{tr}\{\Lambda_{0\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \mathbf{q})\, G_\downarrow^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\lambda_0(-\mathbf{q})\, G_\uparrow^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c, \tag{5}$$

$$q^2\chi_J^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle\langle qJ_{\mathbf{q}}^+, qJ_{-\mathbf{q}}^-\rangle\rangle_\omega^{\{\nu\}}\rangle_c =$$
$$= -\frac{i}{N}\int\frac{dE}{2\pi}\langle\mathrm{tr}\{\Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \mathbf{q})\, G_\downarrow^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\lambda_1(-\mathbf{q})\, G_\uparrow^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c, \tag{6}$$

где

$$\Lambda_{\alpha ij\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \mathbf{q}) = \lambda_{\alpha ij}(\mathbf{q}) - \delta_{ij}\times$$
$$\times\int\frac{d\bar{E}}{2\pi}\, iI_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \bar{E}+\omega; \omega)\sum_{mn} G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\bar{E})\,\Lambda_{\alpha mn\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}, \bar{E}+\omega; \mathbf{q})\times$$
$$\times G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}+\omega), \quad (\alpha = 0,\ 1); \tag{7}$$

$$\left.\begin{aligned}\lambda_{0ij}(\mathbf{q}) = e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}\delta_{ij}, \quad \lambda_{1ij}(\mathbf{q}) = t_{ij}\left(e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}\right),\\ t_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}.\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

Здесь предполагалась локальность только неприводимой вершины частица—дырка $I^{\{\nu\}}_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}(E, \bar{E}+\omega;\ \omega) \equiv I^{\{\nu\}}_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}(E, \bar{E}+\omega;\ E+\omega, \bar{E})$, а tr означает суммирование (без спина) по одночастичным состояниям. Как видно, формула (3) более удобна для вычислений, чем (2), так как уравнение типа Бете—Солпитера (7) для $\alpha = 1$ можно решить без привлечения дальнейших предположений относительно $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}$. Разложение λ_1 и эффективного тока $\Lambda^{\{\nu\}}_1$ с переворотом спина, входящих в (6) и (7), в первом порядке по $\mathbf{q}$ и учет кубической симметрии приводят к формулам

$$\chi^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega) = \frac{i}{3N}\int \frac{dE}{2\pi}\left\langle \mathrm{tr}\left\{\Lambda^{\{\nu\}}_{1\uparrow\downarrow}(E,\ E+\omega)\, G^{\{\nu\}}_{\downarrow}(E+\omega)\,\mathbf{j}G^{\{\nu\}}_{\uparrow}(E)\right\}\right\rangle_c, \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_{1ij\uparrow\downarrow}(E,\ E+\omega) = \mathbf{j}_{ij} - \delta_{ij}\int \frac{d\bar{E}}{2\pi}\, iI^{\{\nu\}}_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}(E,\ \bar{E}+\omega;\ \omega)\times\\ \times\sum_{mn} G^{\{\nu\}}_{im\uparrow}(\bar{E})\,\mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_{1mn\uparrow\downarrow}(\bar{E},\ \bar{E}+\omega)\, G^{\{\nu\}}_{ni\downarrow}(\bar{E}+\omega),\\ \mathbf{j}_{ij} = -it_{ij}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j),\end{aligned} \tag{10}$$

где введены обозначения $\lambda_1(\mathbf{q}) = \mathbf{q}\mathbf{j}$ и $\Lambda^{\{\nu\}}_{1\uparrow\downarrow}(E,\ E+\omega;\ \mathbf{q}) = \mathbf{q}\mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_{1\downarrow\uparrow}(E,\ E+\omega)$. Под знаком шпура $\mathbf{j}$ и $\mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_1$ образуют скалярное произведение.

Отделяя диагональные и недиагональные части $\mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_1$ в (9) и (10), получаем

$$\chi^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega) = \frac{i}{3N}\int \frac{dE}{2\pi}\left\langle \mathrm{tr}\left\{\mathbf{j}G^{\{\nu\}}_{\downarrow}(E+\omega)\,\mathbf{j}G^{\{\nu\}}_{\uparrow}(E)\right\}\right\rangle_c + \tilde{\chi}^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega), \tag{11}$$

где

$$\tilde{\chi}^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega) = \frac{i}{3N}\int \frac{dE}{2\pi}\left\langle \sum_i \mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_{1ii\downarrow\uparrow}(E,\ E+\omega)\,\mathbf{K}^{\{\nu\}}_{ii\downarrow\uparrow}(E+\omega,\ E)\right\rangle_c, \tag{12}$$

$$\mathbf{K}^{\{\nu\}}_{ii\downarrow\uparrow}(E+\omega,\ E) = \sum_{mn} G^{\{\nu\}}_{im\downarrow}(E+\omega)\,\mathbf{j}_{mn}G^{\{\nu\}}_{ni\uparrow}(E). \tag{13}$$

Поскольку конфигурационное усреднение в (12) выходит за рамки CPA, мы воспользуемся приближением [14] $\langle \mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_1 \mathbf{K}^{\{\nu\}}\rangle_c = \langle \mathbf{\Lambda}^{\{\nu\}}_1\rangle_c \langle \mathbf{K}^{\{\nu\}}\rangle_c$, так что

$$\mathbf{K}_{\downarrow\uparrow}(E+\omega,\ E) = \left\langle G^{\{\nu\}}_{\downarrow}(E+\omega)\,\mathbf{j}G^{\{\nu\}}_{\uparrow}(E)\right\rangle_{cii} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \mathscr{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(E+\omega)\,\mathscr{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(E)\,\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0 \tag{14}$$

и $\tilde{\chi}^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega) = 0$ (т. е. нет вершинных поправок) благодаря симметрии относительно обращения времени. Здесь $\mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma}$ — когерентная одночастичная функция Грина с учетом электрон-электронных корреляций (см. ниже). Таким образом, на основе CPA получается формула

$$\chi^{+-}_J(\mathbf{q}=0,\ \omega) = \frac{i}{3N}\int \frac{dE}{2\pi}\sum_{\mathbf{k}} \mathscr{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(E+\omega)\,\mathscr{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(E)\,(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}})^2. \tag{15}$$

Подставляя (15) и предел

$$\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\langle\langle [S^+_{\mathbf{q}},\ {}_qJ^-_{-\mathbf{q}}]\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c = \frac{1}{6N}\sum_{\mathbf{k}\sigma}\langle\langle n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c\,\nabla^2_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}} \tag{16}$$

в формулу (3) и переходя от причинной к запаздывающей («r») функции Грина, приходим к результату

$$D = \frac{1}{6\pi(n_\uparrow - n_\downarrow)}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\mu} dE\,\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathscr{G}^r_{\mathbf{k}\uparrow}(E) - \mathscr{G}^r_{\mathbf{k}\downarrow}(E)\right)^2(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \tag{17}$$

где μ — энергия Ферми. Это выражение формально совпадает с тем, которое следует из RPA—CPA [6, 7, 10] на основе приближения HF.

В настоящем расчете, однако, для функции $\mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma}$ используется схема CLA [16]. Тогда корреляционная часть в терминах частично усредненных причинных функций имеет вид

$$\Sigma^{\nu}_{Uii\sigma}(E)=\int\frac{d\bar{E}}{2\pi i}\,G^{\nu}_{ii-\sigma}(\bar{E})\,T^{\nu}_{i}(E+\bar{E}),\qquad(\nu=A,\ B)\tag{18}$$

$$T^{\nu}_{i}(E)=\left[\frac{1}{U^{\nu}_{i}}+\int\frac{d\bar{E}}{2\pi i}\,G^{\nu}_{ii\sigma}(\bar{E})\,G^{\nu}_{ii-\sigma}(E-\bar{E})\right]^{-1},\tag{19}$$

где T^{ν}_{i} — эффективная двухчастичная вершина. Локальная функция Грина $G^{\nu}_{ii\sigma}(z)$, записанная в виде резольвенты (здесь z — комплексная энергия) перенормируется следующим образом

$$G^{\nu}_{ii\sigma}(z)=\frac{F_{\sigma}(z)}{1-(\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z)-\Sigma_{\sigma}(z))\,F_{\sigma}(z)},\tag{20}$$

$$\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z)=\varepsilon^{\nu}_{i}+\Sigma^{\nu}_{Uii\sigma}(z),\tag{21}$$

$$F_{\sigma}(z)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z),\tag{22}$$

$$\mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z)=(z-\varepsilon_{\mathbf{k}}-\Sigma_{\sigma}(z))^{-1},\tag{23}$$

$$\Sigma_{\sigma}(z)=c\tilde{\varepsilon}^{A}_{\sigma}(z)+(1-c)\,\tilde{\varepsilon}^{B}_{\sigma}(z)-[\tilde{\varepsilon}^{A}_{\sigma}(z)-\Sigma_{\sigma}(z)]\,F_{\sigma}(z)\,[\tilde{\varepsilon}^{B}_{\sigma}(z)-\Sigma_{\sigma}(z)],\tag{24}$$

$$n=\sum_{\sigma}n_{\sigma}=-\frac{1}{\pi}\sum_{\sigma}\int\limits_{-\infty}^{\mu}dE\,\mathrm{Im}\,F^{r}_{\sigma}(E).\tag{25}$$

Здесь Σ_{σ} — когерентный потенциал, n — среднее число электронов на узел. В отличие от обычного CPA [12] атомный потенциал $\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z)$ (в (24) индекс i опущен) приобретает энергетическую зависимость благодаря массовому оператору $\Sigma^{\nu}_{Uii}(z)$ за счет корреляций. В приближении HF решение систем уравнений (20)—(25) упрощается, так как вместо (18) и (19) используется собственная энергия $\Sigma^{\nu HF}_{Uii\sigma}=U^{2}_{i}n^{\nu}_{i-\sigma}$, где $n^{\nu}_{i\sigma}$ — среднее число электронов со спином σ на узлах ν, определяемое формулой

$$n^{\nu}_{i\sigma}=-\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\mu}dE\,\mathrm{Im}\,G^{r\nu}_{ii\sigma}(E).\tag{26}$$

С учетом конкретной вершины $I^{\{\nu\}}_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}(E,\bar{E}+\omega;\,\omega)=-T^{\{\nu\}}_{i}(E+\bar{E}+\omega)$ и заменой $\nu\to\{\nu\}$ мы находим из уравнений (7), (18) и (19) соотношение типа Уорда—Такахаши

$$\omega\Lambda^{\{\nu\}}_{0i\uparrow\downarrow}(E,\,E+\omega;\ \mathbf{q})\,\delta_{ij}-\Lambda^{\{\nu\}}_{1ij\uparrow\downarrow}(E,\,E+\omega;\ \mathbf{q})=e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{i}}G^{\{\nu\}-1}_{ij\downarrow}(E+\omega)-$$
$$-G^{\{\nu\}-1}_{ij\uparrow}(E)\,e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j}},\tag{27}$$

причем

$$(G^{\{\nu\}-1}(E))_{ij\sigma}=(E-\varepsilon^{\nu}_{i})\,\delta_{ij}-t_{ij}-\Sigma^{\{\nu\}}_{Uii\sigma}(E)\,\delta_{ij}.\tag{28}$$

Условие устойчивости основного состояния ферромагнетика относительно спин-волновых возбуждений

$$\hat{D}=D\,(n_{\uparrow}-n_{\downarrow})>0\tag{29}$$

можно получить из спектрального представления

$$\chi^{+-r}(\mathbf{q},\,\omega)=-\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\omega'\,\frac{\mathrm{sign}\,\omega'}{\omega-\omega'+i\varepsilon}\,\hat{I}_{S^{+}_{\mathbf{q}}S^{-}_{-\mathbf{q}}}(\omega'),\tag{30}$$

где спектральная интенсивность $\hat{I}_{S^{+}_{\mathbf{q}}S^{-}_{-\mathbf{q}}}(\omega)\geqslant 0$ относится к конфигурационно-усредненной системе. Магнонный полюс

$$\chi^{+-r}_{p}(\mathbf{q},\,\omega)=-\frac{n_{\uparrow}-n_{\downarrow}}{\omega-Dq^{2}+i\varepsilon}\tag{31}$$

для малых q и ω может быть выделен из континуума Стонера, поскольку спектральный вес возбуждений пар частица—дырка стремится к нулю при $\mathbf{q} \to 0$. Сравнение (30) и (31) приводит к критерию (29). В данном приближении спин-волновое затухание γ_q (вместо $\varepsilon \to 0$ в (31)) принимает вид

$$\gamma_q = \frac{q^2}{n_\uparrow - n_\downarrow} \operatorname{Im} \chi_J^{+-r}(0, Dq^2) = \frac{Dq^4}{3\pi (n_\uparrow - n_\downarrow) N} \sum_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} \mathscr{G}^r_{\mathbf{k}\uparrow}(\mu) \operatorname{Im} \mathscr{G}^r_{\mathbf{k}\downarrow}(\mu) (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (32)$$

как и в RPA—CPA [8], однако здесь учитывается электрон-электронное рассеяние.

2. Результаты численных расчетов и обсуждение

Для проведения части расчета D в аналитической форме мы воспользовались упрощенными выражениями [22]

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\pi w} \left[1 - \left(\frac{E}{w}\right)^2\right]^{1/2} \theta(w - |E|), \quad (33)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 = \frac{2v_m^2}{\pi w} \left[1 - \left(\frac{E}{w}\right)^2\right]^{3/2} \theta(w - |E|), \quad (34)$$

где w — полуширина зоны, v_m — величина порядка wa, a — параметр решетки. Суммирование по $\mathbf{k}$ в (22) приводит с учетом невозмущенной плотности состояний (33) к функции Грина

$$F_\sigma(z) = \frac{2}{w} \left(\tilde{z}_\sigma - i\sqrt{1 - \tilde{z}_\sigma^2}\right), \qquad \tilde{z}_\sigma = \frac{z - \Sigma_\sigma(z)}{w}. \quad (35)$$

Чтобы сделать (35) однозначным, мы выбрали ту ветвь в плоскости $\tilde{z}_\sigma$ с разрезом вдоль действительной оси от -1 до $+1$, где квадратный корень положителен на верхнем берегу разреза.

Переписывая (17) в виде

$$D = \frac{1}{6\pi (n_\uparrow - n_\downarrow)} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE \left[\Pi^{rr}_{\uparrow\uparrow}(E) + \Pi^{rr}_{\downarrow\downarrow}(E) - \Pi^{rr}_{\uparrow\downarrow}(E)\right], \quad (36)$$

где введены обозначения $\Pi^{rr}_{\sigma\sigma'}(E) \equiv \Pi_{\sigma\sigma'}(E^+, E^+)$, $E^+ = E + i0$ и

$$\Pi_{\sigma\sigma'}(z, z') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z) \mathscr{G}_{\mathbf{k}\sigma'}(z') (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (37)$$

затем применяя теорему о вычетах при суммировании по $\mathbf{k}$ в (37) с учетом аппроксимации (34), найдем

$$\Pi^{rr}_{\sigma\sigma} = \frac{2v_m^2}{w^2} \left(3z_\sigma^2 - \frac{3}{2} - 3iz_\sigma \sqrt{1 - z_\sigma^2}\right) \quad z_\sigma = \frac{E^+ - \Sigma_\sigma(E^+)}{w}, \quad (38)$$

$$\Pi^{rr}_{\uparrow\downarrow} = \frac{2v_m^2}{w^2} \left(z_\uparrow^2 + z_\downarrow^2 + z_\downarrow z_\uparrow - \frac{3}{2} + i\,\frac{(1 - z_\uparrow^2)^{3/2} - (1 - z_\downarrow^2)^{3/2}}{z_\uparrow - z_\downarrow}\right). \quad (39)$$

Следовательно,

$$D = \frac{v_m^2}{3\pi w^2 (n_\uparrow - n_\downarrow)} \operatorname{Im} \int_0^{\mu} dE \left[(z_\uparrow - z_\downarrow)^2 - i\sqrt{1 - z_\uparrow^2} \left(3z_\uparrow + \frac{z(1 - z_\uparrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow}\right) - \right.$$

$$\left. - i\sqrt{1 - z_\downarrow^2} \left(3z_\downarrow - \frac{2(1 - z_\downarrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow}\right)\right]. \quad (40)$$

Скалярная статическая электропроводность σ вычисляется в том же приближении, что и D. В результате придем к модифицированной формуле Кубо—Гринвуда

$$\sigma=\frac{e^2N}{6\pi V}\sum_{\sigma}[\Pi^{ra}_{\sigma\sigma}(\mu)-\mathrm{Re}\,\Pi^{rr}_{\sigma\sigma}(\mu)]\equiv\sum_{\sigma}\sigma_{\sigma}, \tag{41}$$

которая содержит функции Грина, перенормированные за счет электронных корреляций в рамках CLA. Здесь $\Pi^{ra}_{\sigma\sigma}(\mu)\equiv\Pi_{\sigma\sigma}(\mu^+,\mu^-)$, $\mu^-=\mu-i0$,

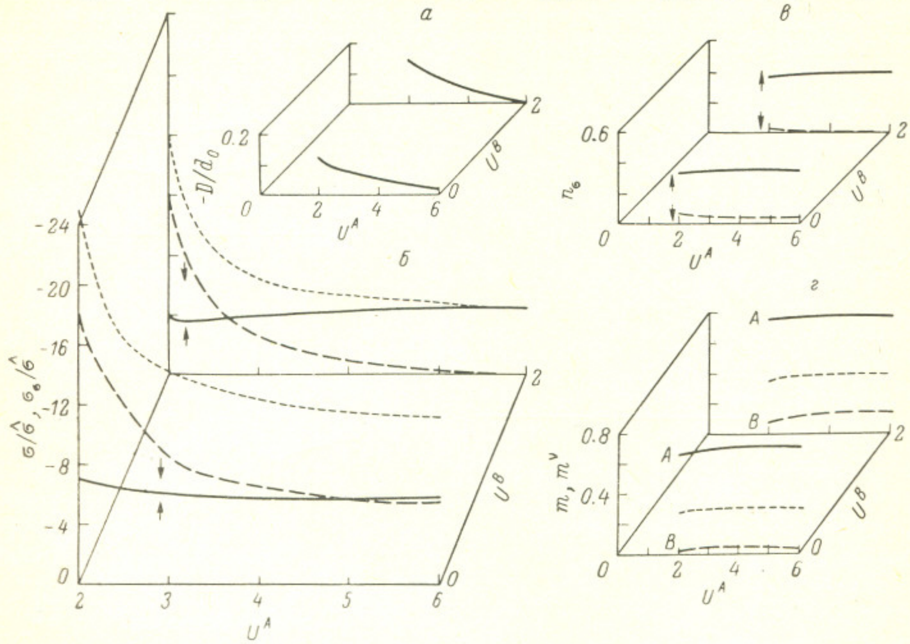

Рис. 1.

а — коэффициент спин-волновой жесткости $D<0$ (нестабильный случай); *б* — статические электропроводности σ_σ, σ; *в* — плотность электронов n_σ; *г* — намагниченности m^ν, m в зависимости от U^ν (ν = A, B); приближение Хартри—Фока; параметры $(w, \varepsilon^A, \varepsilon^B, c, n)=(1, -0.8, 0, 0.4, 0.4)$.

V — объем системы, e — единичный заряд. Вводя (38) и (39) с заменой $\Pi^{ra}_{\sigma\sigma}=\Pi^{rr}_{\uparrow\downarrow}[z_\uparrow\to\hat{z}_\sigma,\ z_\downarrow\to\hat{z}^*_\sigma]$ в формулу (41), мы получим зависящую от спина электропроводность (при $\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\mu^+)<0$)

$$\sigma_\sigma=\hat{\sigma}\pi\left[\frac{2(\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\mu^+))^2}{w^2}+\frac{w}{\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\mu^+)}\mathrm{Re}\left\{i\sqrt{1-\hat{z}^2_\sigma}\left(i(1-\hat{z}^2_\sigma)+\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.+\frac{3}{w}\hat{z}_\sigma\,\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\mu^+)\right)\right\}\right], \tag{42}$$

где

$$\hat{z}_\sigma=\frac{\mu^+-\Sigma_\sigma(\mu^+)}{w},\quad \hat{\sigma}=\frac{e^2v_m^2N}{3\pi^2V}. \tag{43}$$

Численный анализ проводится следующим образом: сначала выбираются параметры w, ε^A, $\varepsilon^B=0$, U^A, U^B, c, n; затем решается самосогласованная система уравнений (18)—(25) с функцией Грина (35). Полученные результаты используются для нахождения D по формуле (40).

На рис. 1 показана переходная область между слабым и сильным ферромагнетизмом в зависимости от внутриатомного отталкивания U^ν, рассматриваемого здесь в приближении HF. В частности, в работе [23] были исследованы решения с параметрами $U^A=2$, $U^B=0$ и $U^A=2$, $U^B=2$, но спиновые волны не рассматривались. Расчеты коэффициента жесткости D $\left(\text{в единицах } d_0=\frac{1}{9}wa^2\right)$ в RPA—CPA (рис. 1, *а*) указывают на нестабильность ферромагнитного состояния относительно возбуждения спиновых волн. Парциальные и полная средние намагниченности $m^{\nu}=n^{\nu}_{\uparrow}-n^{\nu}_{\downarrow}$ и $m=n_{\uparrow}-n_{\downarrow}$ изображены на рис. 1, *г*. На рис. 2 намечена ограниченная область стабильного (в основном насыщенного) ферромагнетизма ($D>0$ (рис. 2, *б*), $m^{\nu}>0$ (рис. 2, *а*)), рассчитанная в хартри-фоковском приближении в зависимости от плотности электронов n. Нуль D при наименьшем значении n соответствует приблизительно критерию Стонера [16], тогда как другой нуль говорит об изменении типа магнитного порядка.

Расчеты для сплавов NiPd были проведены в CLA, и эти результаты (рис. 2, *в*, *г*) сравниваются с данными работы [24]. Параметры для чистых систем выбирались на основе [20]. Сплав формируется с $n=cn^{\mathrm{Pd}}+$

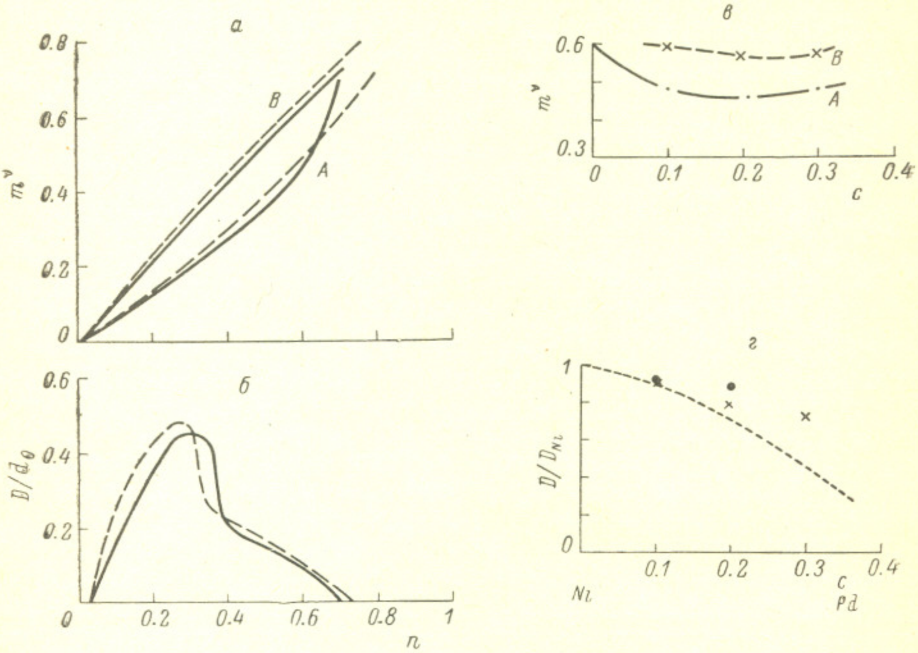

Рис. 2.

а — парциальная намагниченность m^{ν}, *б* — коэффициент жесткости D, *в* — парциальная намагниченность m^{ν}, *г* — спинволновая жесткость $D\,(x)$.
Графики *в* и *г* относятся к случаю сплава Pd_cNi_{1-c}; зависимость от c рассчитана в когерентном лестничном приближении. $((2w)^{\mathrm{Pd}}, (2w)^{\mathrm{Ni}}, \varepsilon^{\mathrm{Pd}}-\varepsilon^{\mathrm{Ni}}, U^{\mathrm{Pd}}, U^{\mathrm{Ni}})=(6.05,\ 4.15,\ 0.3,\ 9.17,\ 14.11)$ эВ, $n^{\mathrm{Pd}}=0.4$, $n^{\mathrm{Ni}}=0.6$. На *г* штриховые кривые — расчет [24], пунктир — эксперимент (ср. [24]).

$+(1-c)\,n^{\mathrm{Ni}}$, а различные интегралы перескока учитываются через ширину зоны

$$2w=c\,(2w)^{\mathrm{Pd}}+(1-c)\,(2w)^{\mathrm{Ni}}.$$

Заметим, что в приведенных единицах величины U^{Pd}, U^{Ni}, $\varepsilon^{\mathrm{Pd}}-\varepsilon^{\mathrm{Ni}}$ для всех c приводятся к шкале $2w=1$. Затравочные U^{ν} перенормируются самосогласованным образом, в результате чего имеем двухчастичные вершины $T^{\nu}_{i}\,(E+\bar{E})$. Расчеты величин $\Gamma^{\nu}=T^{\nu}_{i}\,(2\mu)$ и $\Gamma=c\Gamma^{A}+(1-c)\,\Gamma^{B}$ в приведенных единицах можно найти в [25]. В той же работе [25] для случая сплавов NiFe дано сравнение расчетов $D\,(x)$ на основе CLA с результатами, полученными в рамках RPA—CPA [7, 9] теории «жесткой зоны» [10], а также с данными по неупругому рассеянию нейтронов [1-3]. Коэффициент жесткости для чистого никеля оказывается близким к величине $D_{\mathrm{Ni}}=555$ мэВ Å^2, измеренной при 4.2 K [1].

Проведенный анализ показывает, что степень жесткости магнонной подсистемы сплава довольно чувствительно зависит от того, как мы учитываем межэлектронную корреляцию.

Численные результаты, полученные в рамках CLA, указывают на влияние электрон-электронных корреляций на энергию магнонов в длинноволновом пределе $\omega_q = Dq^2$. Несмотря на однозонное приближение в модели Хаббарда с упрощенной структурой зоны и диагональным беспорядком, для сплавов на основе Ni получены физически разумные значения D. Для зависящих от энергии двухчастичных вершин предполагается локальность, что позволяет сохранить одноузельный характер СРА. Спин-волновое затухание оказывается малым, по крайней мере порядка q^4. Таким образом, в работе предложен самосогласованный метод для нахождения стабильного ферромагнетизма в сплавах переходных металлов.

Авторы благодарны Н. М. Плакиде за чтение рукописи и полезные советы.

Литература

[1] H. A. Mook, J. W. Lynn, R. M. Nicklow. Phys. Rev. Lett., *30*, 556, 1973.
[2] M. Hennion, B. Hennion, A. Castets, D. Tocchetti. Sol. St. Commun., *17*, 899, 1975.
[3] K. Mikke, J. Jankowska, A. Modrzejewski. J. Phys. F, *6*, 631, 1976.
[4] M. Hennion, B. Hennion. J. Phys. F, *8*, 287, 1978.
[5] B. Hennion, M. Hennion. Preprint PSRM, 1510, CEN. Saclay, 1978.
[6] H. Fukuyama. AIP Conf. Proc., *10*, 1127, 1973.
[7] D. J. Hill, D. M. Edwards. J. Phys. F, *3*, L162, 1973.
[8] H. Fukuyama. J. Physique, *35*, C4—141, 1974.
[9] R. Riedinger, M. Nauciel-Bloch. J. Phys. F, *5*, 732, 1975.
[10] D. M. Edwards, D. J. Hill. J. Phys. F, *6*, 607, 1976.
[11] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., *A276*, 238, 1963.
[12] B. Velický, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich. Phys. Rev., *175*, 747, 1968.
[13] A. Jezierski. Acta Phys. Pol., *A51*, 839, 1977.
[14] E. Kolley, W. Kolley. Commun. JINR, E17-11771, Dubna, 1978.
[15] E. Kolley, W. Kolley. Phys. St. Sol. (b), *81*, 735, 1977.
[16] E. Kolley, W. Kolley. Phys. St. Sol. (b), *86*, 397, 1978.
[17] Ю. А. Бабанов, В. Е. Найш, О. Б. Соколов, В. К. Финашкин. ФММ, *35*, 1123, 1973; ФММ, *35*, 1132, 1973.
[18] J. Kanamori. Progr. Theor. Phys. (Kyoto), *30*, 275, 1963.
[19] S. Hirooka, M. Shimizu. J. Phys. Soc. Japan, *43*, 70, 1977.
[20] S. Hirooka, M. Shimizu. J. Phys. Soc. Japan, *43*, 477, 1977.
[21] D. M. Edwards, B. Fisher. J. Physique, *32*, C1—697, 1971.
[22] B. Velický. Phys. Rev., *184*, 614, 1969.
[23] G. F. Abito, J. W. Schweitzer. Phys. Rev. B, *11*, 37, 1975.
[24] A. Jezierski. Acta Phys. Pol., *A52*, 413, 1977.
[25] E. Kolley, W. Kolley, A. L. Kuzemsky. Preprint JINR, E17-11899, Dubna, 1978.

Поступило в Редакцию
6 октября 1978 г.
В окончательной редакции
11 июня 1979 г.