

PACS numbers: 71.15.Ap, 71.20.-b, 71.27.+a, 71.28.+d, 72.10.-d, 75.30.-m, 75.40.-s

Електронна структура та взаємочин атомового і магнетного порядків стопів з вузькими d -зонами

С. П. Репецький*, В. А. Татаренко***, І. М. Мельник*, Є. Г. Ленъ**

**Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра фізики функціональних матеріалів,
просп. Акад. Глушкова, 2,
03022 Київ-22, Україна*

***Інститут металлофизики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03680, ГСП, Київ-142, Україна*

В огляді представлено результати дослідження взаємочину атомового й магнетного порядків у стопах з вузькими d -зонами. Розглянуто основні теоретичні підходи до опису невпорядкованих стопів з сильними електронними кореляціями та визначено межі їх застосовності. Проаналізовано зв'язок зміни атомового й магнетного порядків таких стопів з перебудовою їхнього електронного енергетичного спектру.

В обзоре представлены результаты исследования взаимного влияния атомного и магнитного порядков в сплавах с узкими d -зонами. Рассмотрены основные теоретические подходы к описанию неупорядоченных сплавов с сильными электронными корреляциями и определены границы их применимости. Проанализирована связь изменения атомного и магнитного порядков таких сплавов с перестройкой их энергетического спектра электронов.

In the review, results of investigation of interplay of atomic and magnetic orders in alloys with narrow d -bands are presented. The basic theoretical approaches to a description of the disordered alloys with strong electron correlations are considered, and validity ranges of these approaches are outlined. The interplay between the changes of atomic and magnetic orders in such alloys and the realignment of their electron energy spectrum is analysed.

Ключові слова: електронна структура, сильні електронні кореляції, магнетний порядок, атомовий порядок, електронний транспорт.

(Отримано 3 квітня 2008 р.)

1. МЕТОДИ ОПИСУ НЕВПОРЯДКОВАНИХ СТОПІВ

Сучасна прикладна наука та інженерія вимагають широкого спектру властивостей конструкційних та функціональних матеріалів. Один зі шляхів урізноманітнити властивості матеріалів полягає у використанні систем з різним ступенем неупорядкованості атомової і магнетної структур. У зв'язку з цим виникає необхідність всебічного теоретичного дослідження таких систем. Значні успіхи у вивченні властивостей неупорядкованих систем пов'язані насамперед з розвитком їх електронної теорії. Дослідження електронної підсистеми та особливостей її взаємодії з йонами кристалічної ґратниці дозволяють пояснити структуру і властивості конкретних матеріалів, спрогнозувати характер їхньої поведінки в тих чи інших реальних умовах.

Протягом багатьох років не припинялися спроби поєднати методи розрахунку електронної структури, які розвивалися для двох принципово відмінних випадків будови кристалічних систем. З одного боку, це методи, які застосовні для ідеальних кристалів (або цілком впорядкованих систем), наприклад, методи приєднаних плоских хвиль (ППХ) та Коррінґи–Кона–Ростокера (ККР), метода псевдопотенціалу, лінійна метода МТ-орбіталь (ЛМТО) та інші. Їх опис зараз можна зустріти у багатьох підручниках і монографіях (див., наприклад, [1]). До цього ж класу підходів відносяться й різні варіанти методу, що розглядають не хвильові функції, а функціонали густини (наближення локальної густини (НЛГ), методи ґрадієнтного та узагальненого ґрадієнтного наближень для функціоналу густини, наближення локальної спінової густини (НЛСГ) та інші) [2–5]. З другого боку, це методи, які розвивалися для неупорядкованих систем, зокрема, різноманітні кластерні методи (наприклад, такі, що базуються на наближенні молекулярних орбіталь в рамках методи лінійної комбінації атомових орбіталь (МО ЛКАО)), які підміняють реальний кристал деяким кластером (що може складатися з десятків і сотень атомів) (див. [6]). Це також методи теорії неупорядкованих систем, які розглядають кластер в ефективному середовищі, наприклад, метода когерентного потенціалу (НКП) та його комбінація з методою ККР (ККР–НКП) (див., наприклад, [6, 7]). Однак ці методи також не розв'язали проблему опису електронної структури систем з довільним ступенем упорядкованості.

В останні десятиріччя, для розв'язання цієї задачі вдалося розробити підходи, що використовують комбінацію різних метод опису електронної структури як ідеальних кристалів, так і неупорядкованих систем. Найбільш продуктивними виявилися комбінації методу, що розвинуті для ідеальних кристалів, зокрема, метода функціоналу густини з кластерними підходами [8–10] та методами теорії неупорядкованих систем [8, 11–15]. Відповідне узагальнення під-

ходів, які були розвинуті для цілком впорядкованих кристалів, стримувалося складністю проведення усереднення по різних конфігураціях, що характеризують неупорядковану систему. Суттєву роль в реалізації нових підходів відіграв бурхливий прогрес в області обчислювальної техніки. При цьому стало можливим не лише поєднання підходів теорії твердого тіла, а й відбулося вдале залучення останніх досягнень, наприклад, інформатики. Так поєднання методи функціоналу густини з генетичними алгоритмами [16, 17] забезпечило зменшення часу розрахунку для різних конфігурацій великих кластерів (або елементарних комірок, що містять кілька десятків атомів) на декілька порядків, порівняно зі звичайною комбінацією функціоналу густини та кластерних метод. Такі підходи дозволили також досліджувати магнетні властивості неупорядкованих систем.

Подальшого розвитку набули й методи, що базуються на формалізмі хвильових функцій, наприклад, на наближеннях сильного зв'язку та МТ-орбіталі [14, 18–26], які також, здебільшого, дозволяють окрім атомового впорядкування дослідити й магнетні властивості металів і стопів та напівпровідників з домішками. Чільне місце у сучасній фізиці твердого тіла займають й першопринципні методи, що базуються на прямому числовому моделюванні фізичних властивостей великих кластерів [20], зокрема, за допомогою методи Монте-Карло [10, 27]. Результати таких розрахунків часто приймаються за еталон при оцінці адекватності інших підходів.

Найбільші успіхи у дослідженні неупорядкованих систем досягнуті для стопів заміщення. При зміні зовнішніх умов у стопах разом з перетворенням типу лад–безлад можуть відбуватися магнетні та структурні фазові переходи. Згідно сучасній мікроскопічній теорії, ці явища в багатьох випадках пов'язані з особливостями енергетичного спектру електронів. При цьому енергетична вигідність нової структури визначається величиною термодинамічного потенціалу. Такий підхід дозволяє побудувати теорію фазових переходів для цілого ряду конкретних стопів.

У порівнянні з ідеальними кристалами електронна структура неупорядкованих систем має більш складний характер. Оскільки в таких системах відсутня трансляційна симетрія, то поряд з «широкими» зонними станами, розподіленими по кристалу, існують також і льюкалізовані стани, хвильові функції яких зосереджені біля вузлів кристалічної ґратниці. Вперше на існування льюкалізованих станів у неупорядкованих системах вказав Андерсон [28]. Ним сформульовано фундаментальну теорему про вплив безладу на спектр збудження: хвильові функції льюкалізовані, якщо «величина» безладу перевищує певне значення. «Величина» безладу характеризується співвідношенням W/B , де W — максимальна зміна випадкового потенціалу (глибини ями) і B — ширина зони, що виникає внаслідок перекриття хвильових функцій сусідніх атомів. За Андерсо-

ном, існує критична величина $(W/B)_{кр}$, при якій усі стани льюкалізовані.

Пізніше було зроблено припущення про можливість розвитку Фермі-рідинного підходу в описі льюкалізованих станів [29], а згодом і побудовано таку теорію [30].

Відсутність трансляційної симетрії в неупорядкованих стопах призводить до неможливості використання стандартних зонних методів. Дослідженню теоретичних підходів, що застосовуються для розрахунку електронної структури і пов'язаних з нею фізичних властивостей неупорядкованих стопів, присвячено багато праць (див. огляди [7, 31, 32]). Найсучасніші й перспективні дослідження у цьому напрямку спираються на підходи з «перших принципів». Під цим слід розуміти, що хоча модель може не бути точним, але при його розробці виходять з принципів квантової механіки і за наявності численних наближень не вводять феноменологічних параметрів. У таких моделях використовується коректний граничний перехід до зонних методів опису електронної структури впорядкованих твердих тіл. Далі розглянемо детально найбільш застосовні «першопринципні» підходи до опису неупорядкованих стопів.

Для опису електронної структури неупорядкованого стопу необхідно обрати певним чином потенціал і знайти з рівняння Шредингера для даної конфігурації власні значення та власні функції, необхідні для розрахунку «спостережних» величин, які в загальному випадку визначаються матричними елементами операторів. Будь-яка експериментально вимірювана величина являє собою результат усереднення по об'єму або, іншими словами, по усіх можливих конфігураціях. Таким чином, для одержання «спостережних» величин окрім квантово-механічного необхідно провадити ще й конфігураційне усереднення. Це означає, що для опису електронної енергетичної структури неупорядкованого стопу потрібно розрахувати власні функції рівняння Шредингера для всіх можливих конфігурацій. Така задача є досить громіздкою і нераціональною.

Найбільш успішним вирішенням зазначеної проблеми є застосування формалізму, що базується на методі Грінних функцій і дозволяє безпосередньо розраховувати «спостережувані» величини. Так одночастинковий Грінів оператор визначає всі спектральні характеристики електронної підсистеми стопу і містить всю інформацію, необхідну для розрахунку його рівноважних властивостей.

Одночастинкова Грінова функція стопу, яка є аналітичною функцією у верхній напівплощині значень комплексної енергії z , визначається виразом:

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad (1)$$

де H — Гамільтоніян системи, який в одноелектроннім наближенні можна представити у вигляді

$$H = U + V, \quad V = \sum_n V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (2)$$

Тут U — оператор кінетичної енергії електрона; V — потенціальна енергія електрона у стопі; $V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ — потенціальна енергія електрона в полі заряду окремого йона, екранованого зарядом вільних електронів.

Для розрахунків фізичних властивостей неупорядкованих систем використовується усереднена по різних конфігураціях атомів (конфігураційно усереднена) Грінова функція:

$$\langle G(z) \rangle = \langle (z - H)^{-1} \rangle. \quad (3)$$

Тут дужки $\langle \dots \rangle$ позначають конфігураційне усереднення. Так густина одноелектронних станів неупорядкованої системи в розрахунку на один атом пов'язана з конфігураційно усередненою Гріновою функцією виразом:

$$g(E) = -(\pi N)^{-1} \text{Im Sp} \langle G(E^+) \rangle, \quad E^+ = E + i\delta \quad (\delta \rightarrow +0), \quad (4)$$

де N — число атомів у кристалі.

Сучасний формалізм розрахунку оператора Грінової функції базується на методах теорії багатократного розсіяння. При описі основних положень теорії багатократного розсіяння скористаємося однозонним наближенням, а також наближенням діагонального безладу, в якому залежними від випадкового розподілу атомів стопу є тільки діагональні матричні елементи Гамільтоніану (2). Останнє наближення виправдане лише за умови достатньо сильної локалізації атомових потенціалів $V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ на вузлах кристалічної ґратниці.

У цьому випадку Гамільтоніан, що описує одноелектронні стани бінарного стопу заміщення, можна представити у вигляді

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = \sum_{n, n' \neq n} |n\rangle h_{nn'} \langle n'|, \quad V = \sum_n |n\rangle v_n \langle n|, \quad (5)$$

де $h_{nn'}$ — недіагональний (у представленні на функціях Ваннье $\varphi_n(\mathbf{r})$) матричний елемент Гамільтоніана (так називаний інтеграл перескоку), який у прийнятому нами наближенні діагонального безладу не залежить від випадкового розподілу атомів; $|n\rangle$ — вектор Ваннье, який визначається виразом $\varphi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n \rangle$; v_n — діагональний матричний елемент, що набуває значень v^A або v^B в залежності від того, який атом, — A чи B , — знаходиться у вузлі n . У загальнім випадку ортонормовані одночастинкові функції Ваннье $\varphi_{\alpha n}(\mathbf{r})$ пов'язані з Блоховими функціями $\psi_{\alpha k}(\mathbf{r})$ співвідношенням [32, 33]

$$\Psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \varphi_{\alpha n}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

де \mathbf{r} , \mathbf{k} — відповідно радіус-вектор і хвильовий вектор електрона; \mathbf{r}_n — радіус-вектор вузла n кристалічної ґратниці; α — номер енергетичної зони. В наближенні сильного зв'язку в якості функцій Ваньє обираються хвильові функції електронів в ізольованому атомі, центровані на різних вузлах ґратниці.

Зауважимо, що теорія багатократного розсіяння застосовна для будь-якого одночастинкового Гамільтоніану, в якому член, що відповідає випадковому потенціалу, може бути зведений до суми внесків, пов'язаних з кожним вузлом (див. (2)). В рамках цієї теорії розсіяння електрона на атомових потенціалах описується оператором T -матриці розсіяння, який пов'язаний з оператором Грінової функції співвідношенням [7, 31]:

$$G = G_0 + G_0 T G_0, \quad (7)$$

де $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$ — Грінова функція для Гамільтоніана нульового наближення H_0 .

Оператор T -матриці розсіяння на випадковім потенціалі системи V повністю визначає Грінову функцію і задовольняє рівнянню:

$$T = V + V G_0 T. \quad (8)$$

Якщо повний потенціал стопу записати у вигляді суми потенціалів у вузловому представленні (2), то згідно (8) повний оператор T -матриці можна подати у вигляді нескінченного ряду

$$T = \sum_n t_n + \sum_n t_n G_0 \sum_{m \neq n} t_m + \sum_n t_n G_0 \sum_{m \neq n} t_m G_0 \sum_{p \neq m} t_p + \dots, \quad (9)$$

де

$$t_n = (1 - V_n G_0)^{-1} V_n = V_n + V_n G_0 t_n \quad (10)$$

— одновузловий t -оператор, що описує розсіяння електронів на потенціалі V_n . Доданки у виразі (9) описують відповідно процеси однократного, двократного і т.д. розсіяння електронів у кристалі.

Приймаючи до уваги те, що в наближенні діагонального безладу оператор G_0 є конфігураційно незалежним, згідно виразу (7), конфігураційно усереднена Грінова функція матиме вигляд:

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 \langle T \rangle G_0, \quad (11)$$

де

$$\langle T \rangle = \sum_n \langle t_n \rangle + \sum_n \sum_{m \neq n} \langle t_n G_0 t_m \rangle + \sum_n \sum_{m \neq n} \sum_{p \neq m} \langle t_n G_0 t_m G_0 t_p \rangle + \dots \quad (12)$$

Усереднену Грінову функцію системи можна подати ще й у вигляді

$$\langle G(z) \rangle = (z - H_0 - \Sigma)^{-1}, \quad (13)$$

де Σ — масовий оператор усередненої Грінової функції.

Перші дві суми у виразі (12) можна усереднити точно. При усередненні ж третього і наступних доданків виникає проблема врахування статистичних кореляцій, обумовлених багатократним розсіянням електронів на декількох атомах.

Найпростіший шлях вирішення цієї проблеми полягає в переході до одновузлового наближення, в якому нехтується кореляційними ефектами.

В рамках такого підходу вирази для усереднених $\langle T \rangle$ та $\langle G \rangle$ запишуться відповідно як:

$$\langle T \rangle = \sum_n \langle t_n \rangle + \sum_n \langle t_n \rangle G_0 \sum_{m \neq n} \langle t_m \rangle + \sum_n \langle t_n \rangle G_0 \sum_{m \neq n} \langle t_m \rangle G_0 \sum_{p \neq m} \langle t_p \rangle + \dots, \quad (14)$$

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 \langle V \rangle \langle G \rangle = (z - H_0 - \langle V \rangle)^{-1}. \quad (15)$$

У неупорядкованім стопі усереднений одновузловий t -оператор є трансляційно-інваріантною величиною. Таким чином, зміст одновузлового наближення полягає в моделюванні середніх по конфігураціях властивостей стопу властивостями деякого трансляційно-інваріантного ефективного середовища, тобто усереднений T -оператор $\langle T \rangle$ апроксимується оператором:

$$T_{\text{еф}} = \sum_n t_n^{\text{еф}} + \sum_n t_n^{\text{еф}} G_0 \sum_{m \neq n} t_m^{\text{еф}} + \sum_n t_n^{\text{еф}} G_0 \sum_{m \neq n} t_m^{\text{еф}} G_0 \sum_{p \neq m} t_p^{\text{еф}} + \dots \quad (16)$$

Ріжні методи розрахунку електронної структури неупорядкованих стопів в одновузловім наближенні відрізняються один від одного способом введення $t^{\text{еф}}$. Найбільш застосовними методами є: наближення віртуального кристалу (НВК), наближення середньої T -матриці (НСТМ) і наближення когерентного потенціалу (НКП).

Наближення НВК (див. (14), (15)) є одним з самих грубих наближень при обчисленні усередненої Грінової функції (15). Масовий оператор усередненої Грінової функції (13) в такому наближенні дорівнює $\Sigma = \langle V \rangle$. Кожен вузол ефективного середовища характеризується дійсним і незалежним від енергії потенціалом

$$V_{\text{НВК}}(\mathbf{r}) = c_A V_A(\mathbf{r}) + c_B V_B(\mathbf{r}), \quad (17)$$

який визначає t^{ef} (див. (10)) і представляє собою середнє значення потенціалів компонентів стопу A і B з ваговими множниками типу їх відносних концентрацій c_A, c_B . У наближенні віртуального кристалу спектер енергії електронів у стопі відрізняється від енергетичного спектру електронів у чистім металі зсувом значень енергії на постійну величину

$$\Sigma = \sigma I, \quad \sigma = y\delta, \quad (18)$$

де $\delta = v^B - v^A$; y — концентрація домішки; I — одинична матриця. Зазначене наближення є точним лише у граничній випадку малої величини потенціалу домішкового розсіяння δ ; тому воно часто використовується при слабких збуреннях [31].

Більш адекватним у порівнянні з НВК є наближення середньої T -матриці, в якому суперпозиційне наближення (17) записується не для вузлових потенціалів, а для вузлових t -операторів t_A (t_B) компонентів A (B) стопу:

$$\langle t \rangle = c_A t_A(\varepsilon) + c_B t_B(\varepsilon). \quad (19)$$

У цьому випадку потенціал ефективного середовища, на відміну від потенціалу в НВК, буде комплексним і залежним від енергії, тобто більш якісно описуватиме електронну структуру неупорядкованих стопів.

Масовий оператор в НСТМ, вперше одержаний у роботі [34], має вигляд:

$$\Sigma = \sigma I, \quad \sigma = \frac{y\delta}{1 - (1 - y)\delta(G_0)_{00}}. \quad (20)$$

Тут $(G_0)_{00}$ — діагональний у вузловому зображенні матричний елемент Грінової функції нульового наближення. Наближення середньої T -матриці для малих концентрацій домішки розвинено в роботах [35, 36] і узагальнено в [31].

Наближення середньої T -матриці коректно описує середнє розсіяння на окремому вузлі кристалічної ґратниці. Ефективний розсіювач у цьому наближенні генерує розсіяну хвилю з падаючої, яка являє собою суперпозицію хвиль, розсіяних на всіх інших вузлах ефективного середовища. Очевидно, що в загальному випадку НСТМ буде не самоузгодженим у тому розумінні, що властивості окремого розсіювача не будуть узгоджуватися з властивостями середовища, яке складається з таких розсіювачів. Цей недолік НСТМ може бути усунений, якщо властивості ефективного середовища з самого початку визначити самоузгодженим чином. В електронній теорії стопів таким самоузгодженим наближенням є НКП.

В наближенні когерентного потенціалу складові Гамільтоніану системи (5) переозначаються наступним чином:

$$H = \tilde{H} + \tilde{V}, \quad \tilde{H} = H_0 + \sum_n |n\rangle\sigma\langle n|, \quad \tilde{V} = V - \sum_n |n\rangle\sigma\langle n|, \quad (21)$$

де σ — потенціал деякого ефективного трансляційно-інваріантного середовища (когерентний потенціал); \tilde{H} — Гамільтоніан ефективного середовища; \tilde{V} — відхил кристалічного потенціалу V від потенціалу ефективного середовища σ . У цьому випадку система рівнянь (9) набуває вигляду:

$$T_n = t_n + t_n \tilde{G} \sum_{m \neq n} T_m, \quad (22)$$

$$t_n = (I - \tilde{V}_n \tilde{G})^{-1} \tilde{V}_n. \quad (23)$$

Тут t_n — оператор розсіяння на одному вузлі, що знаходиться в ефективній середовищі; $\tilde{G}(z) = (z - \tilde{H})^{-1}$ — Грінтова функція ефективного середовища.

Ефективне середовище в НКП обирається таким чином, щоб кожен вузол характеризувався деяким ефективним когерентним потенціалом σ , який, подібно до НСТМ, є комплексним і енергетично залежним. У цьому випадку когерентний потенціал буде визначатися з умови відсутності процесів розсіяння електронів на одному вузлі, що знаходиться в ефективному середовищі, тобто з рівняння:

$$\langle t_n \rangle \equiv c_A t_n^A + c_B t_n^B = 0. \quad (24)$$

Використовуючи вирази (21) і (23), з рівняння (24) можна одержати рекурентний вираз для когерентного потенціалу:

$$\sigma = \frac{y\delta}{1 - (\delta - \sigma)\tilde{G}_{00}}, \quad (25)$$

Якщо знехтувати в (12) внеском статистичних кореляцій, обумовлених розсіянням електронів на декількох атомах, то для конфігураційно усередненої T -матриці одержимо $\langle T \rangle = \sum_n \langle t_n \rangle = 0$. Тобто

в даному наближенні відсутні процеси розсіяння електронів в середовищі, яке описується когерентним потенціалом. Конфігураційно усереднена Грінтова функція в цьому наближенні дорівнює $\langle G \rangle = \tilde{G}$.

Розглянуте наближення когерентного потенціалу вперше було запропоновано в роботах Тейлора [37] та Совена [38] для розрахунку фононних і електронних станів відповідно. Тейлор назвав цю методу «самоузгодженою», а в роботі Совена було введено термін «ме-

тода когерентного потенціалу». Рівняння для когерентного потенціалу були потім одержані в багатьох роботах за допомогою різних підходів і знайшли широке застосування при описі фізичних властивостей неупорядкованих середовищ (див., наприклад, [7, 31, 32]).

Не зважаючи на те, що наближення когерентного потенціалу (НКП) є найбільш точним одноузловим наближенням, воно не враховує багаточастинкові міжатомові кореляції, від яких суттєво залежать властивості неупорядкованих системи. Для врахування таких міжатомових кореляцій необхідно вийти за рамки одноузлового наближення, тобто врахувати розсіяння на кластерах. Цій проблемі присвячено багато праць, огляд яких зроблений в монографії [32].

Кластерні узагальнення НКП, які базуються на розгляді одиничного кластера в ефективному середовищі, не гарантують аналітичності та трансляційної інваріантності конфігураційно усередненої Грінової функції [31]. Задача побудови самоузгодженої апроксимації, що враховує розсіяння на кластерах при збереженні аналітичності та трансляційної інваріантності усередненої по конфігураціях Грінової функції системи вирішена в методі приєднаного простору [39–41] і наближенні «блукуючого кластера» [42], еквівалентність яких доведена в роботі [43]. Узагальнення методи приєднаного простору на випадок стопів з близьким порядком виконано в роботах [44–47]. Однак у зазначених методах важко оцінити точність зроблених наближень, оскільки в них не вводиться будь-який малий параметер.

В роботі [48] розроблено методу розвинення масового оператора по малому параметру R_0^{-3} (R_0 — довжина згасання інтеграла перескоку в одиницях сталої ґратниці стопу). В роботах [49, 50] зазначена метода використана для побудови теорії електропровідності неупорядкованих стопів. Проте застосування цієї методи обмежено вимогою великого R_0^3 , що не завжди виконується. Треба також вказати на розвинуту в роботах [51, 52] методу розвинення за недіагональним матричним елементом Грінової функції ефективного середовища (метода γ -розвинення). В роботі [52] методу застосовано для розрахунку параметрів близького і далекого порядків стопів. Однак зазначений підхід справедливий лише у випадку сильного розсіяння та високої концентрації домішки.

Ввести малий параметер також вдалося в методі розрахунку усередненої Грінової функції та вільної енергії електронів стопу, що запропонований у роботах [53–59]. Ця метода базується на розвиненні T -матриці розсіяння за одноцентровими операторами розсіяння та наступним розчепленні середнього від добутку одноцентрових операторів на добуток середніх від добутку пар операторів. За нульове наближення в зазначеному підході обрано НКП. Зазначена метода дозволила розрахувати електронну структуру та енергію

впорядкування стопів [53–54], параметри близького порядку і ефективної міжатомової взаємодії [56–57], дослідити стабільність впорядкованих фаз [58]. Однак питання про точність зроблених наближень залишилось відкритим.

Оцінити точність наближень, які робляться при кластернім розвиненні дозволяє метода, запропонована у роботах [60, 61]. Ця метода враховує статистичні кореляції при кластернім розвиненні одно- та двочастинкової Грінових функцій, які визначають відповідно густину електронних станів та електропровідність неупорядкованої системи. За нульове наближення у цій методі обирається НКП, а потім знаходяться поправки до нього шляхом підсумовування внесків процесів розсіяння на кластерах із двох, трьох і т.д. розсіювальних центрів. Показано, що внески процесів розсіяння зменшуються зі збільшенням числа вузлів в кластері за деяким малим параметром, який є аналогічним введеному раніше в роботі [59]. Дослідження цього параметру показує [54, 60–62], що він є малим в широкій області зміни характеристик стопу (включаючи концентрацію компонентів), за винятком вузьких інтервалів значень енергії на краях спектра. Однак у зазначених вище роботах не враховано взаємодію електронів з коливаннями кристалічної ґратниці та електрон-електронну взаємодію, які можуть істотно впливати на властивості неупорядкованої системи.

Врахувати Кульонові ефекти, що визначають розподіл зарядової густини, вдалося у так названому наближенні поліморфного когерентного потенціалу (НПКП), одержаного, так як і НКП, в рамках теорії багатократного розсіяння [18]. Внесок електрон-фононої взаємодії враховано у виразах для термодинамічного потенціалу та електронної теплоємності неупорядкованих стопів, наведених у роботі [63]. В роботах [64, 65] досліджено вплив електрон-фононої взаємодії на електропровідність неупорядкованих стопів. Однак в зазначених роботах [63–65] не враховані міжатомові кореляції, а електрон-фононна взаємодія вважалась слабкою. Крім того, одержані в роботі [65] вирази справедливі лише при високих температурах, коли теплові зміщення атомів можуть бути описані в квазикласичним наближенні.

З урахуванням електрон-фононої і електрон-електронної взаємодій у роботах [66–69] одержано кластерне розвинення для двочастинкових загаяних Грінових функцій, термодинамічного потенціалу та електропровідності неупорядкованого кристалу. Електронні стани системи описано в рамках багатозонного моделю сильного зв'язку (матричні елементи Гамільтоніану розраховуються за методом Слетера–Костера [70–72]). Розрахунки базуються на діаграмній техніці для температурних Грінових функцій. За нульове одновузлове наближення в цій методі кластерного розвинення обрано НКП. Показано, що внески процесів розсіяння елементарних збуджень на

кластерах зменшуються зі збільшенням числа вузлів в кластері за деякими малими параметрами [66]. Цей підхід дозволяє розрахувати електронну структуру, вільну енергію, значення льокалізованих магнетних моментів та параметрів кореляції в розташуванні атомів і орієнтації магнетних моментів на вузлах кристалічної ґратниці стопів з вузькими d -зонами.

У цьому підході електрон-електронна взаємодія описується відповідним масовим оператором, який має наступний вигляд [66, 67]:

$$\Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}(\epsilon) = \Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(1)} + \Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(2)}, \quad (26)$$

де

$$\begin{aligned} \Sigma_{ee\ n, n'}^{(1)} &= -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' f(\epsilon') \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} \left[G_{n_1, n_2}^{aa^+}(\epsilon') - G_{n_2, n_1}^{aa^+ *}(\epsilon') \right], \\ \Sigma_{ee\ n, n'}^{(2)}(\epsilon) &= -\left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_2 \tilde{v}_{n_2, n_1}^{(2) n, n_3} \times \\ &\times \left\{ f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \left[G_{n_5, n_2}^{aa^+ *}(\epsilon - \epsilon_1 + \epsilon_2) G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\epsilon_1) - G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\epsilon - \epsilon_1 + \epsilon_2) G_{n_4, n_1}^{aa^+ *}(\epsilon_1) \right] \times \right. \\ &\times \left[G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\epsilon_2) - G_{n_3, n_6}^{aa^+ *}(\epsilon_2) \right] + f(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon) \left[G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\epsilon_2) - G_{n_5, n_2}^{aa^+ *}(\epsilon_2) \right] \times \\ &\times \left. \left[G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\epsilon_1) G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon) - G_{n_4, n_1}^{aa^+ *}(\epsilon_1) G_{n_3, n_6}^{aa^+ *}(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon) \right] \right\} \tilde{v}_{n_6, n}^{(2) n_4, n_5}, \\ \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} &= v_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} - v_{n', n_1}^{(2) n, n_2} \quad (n \equiv ni\gamma). \end{aligned}$$

Перший член у правій частині рівності (26) відповідає наближенню середнього поля. Другий член враховує електронні кореляції, що пов'язані з виходом за рамки середнього поля. Масовий оператор (26) враховує всі види взаємодії між електронами в системі, у тому числі, статичні та динамічні флюктуації зарядової та спінової густин. Якщо відволіктись від часової залежності електронної густини, то взаємодія між електронами призводить до їх випадкового перерозподілу по вузлах кристалічної ґратниці, тобто до статичних флюктуацій зарядової та спінової густин. Цей перерозподіл можна наближено представити як флюктуації деякого ефективного потенціалу, який у випадку неупорядкованих стопів додається до випадкового атомового потенціалу w у виразі для повного масового оператора неупорядкованої системи:

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^{n_i i_1}(\epsilon) &= \Sigma^{n_i i_1} - \sigma_e^{n_i i_1}(\epsilon), \\ \Sigma_{ni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma}^{n_i i_1} &= (w_{ni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma}^{n_i i_1} + \frac{1}{2} \tilde{v}_{n_i i_1 \gamma_1, -\sigma, n' i' \gamma' \sigma}^{(2) ni\gamma\sigma, n_i i_1 \gamma_1, -\sigma} Z_{n_i i_1 \gamma_1 - \sigma}) \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (27) \end{aligned}$$

де

$$w_{ni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma}^{n_1 i_1} = \sum_{\lambda} c_{n_1 i_1}^{\lambda} w_{ni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma}^{\lambda n_1 i_1}; \quad Z_{ni\gamma, -\sigma} = \sum_{\lambda} c_{ni}^{\lambda} Z_{ni\gamma, -\sigma}^{\lambda m_{\lambda i}}$$

Найсуттєвішими припущеннями, що були використані при переході від точного виразу (26) до другого доданку у виразі (27), є нехтування недіагональними по індексах вузлів елементами масового оператора $\Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}(\epsilon)$ та доданком $\Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(2)}(\epsilon)$. Це середньопольове наближення використовувалося в попередніх роботах [73–75].

Зазначена теорія є одним з варіантів теорії типу середнього поля. Однак більшість таких теорій мають суттєвий недолік, на який було вказано в роботі [76]: через діагональне наближення для масового оператора вони можуть описувати лише електронні кореляції на одному вузлі, тобто вони не враховують такі збурення електронної системи, як, наприклад, спінові хвилі (магнони).

У роботах [76, 77] для подолання цього недоліку було запропоновано самоузгоджене динамічне кластерне наближення для середньопольових підходів. Це дозволило для Гамільтоніанів, подібних до Гамільтоніану Хаббарда, в рамках наближення середнього поля врахувати нелокальний динамічний характер взаємодії спінів сильнокорельованих електронів, тобто спінові хвилі.

Якщо врахувати, що розподіл електронної густини по вузлах кристалічної ґратниці визначається взаємодією електронів на різних вузлах і змінюється у просторі й часі, то відповідні збудження і будуть динамічними флюктуаціями зарядової і спінової густин, які можна описати розповсюдженням по кристалу відповідних хвиль.

Для виділення внесків від динамічних флюктуацій, які описують розповсюдження в кристалі спінових та зарядових хвиль потрібно перенормувати Гамільтоніан нульового наближення, додавши до нього трансляційно-інваріантну складову масового оператора електрон-електронної взаємодії, яка одержується з виразу (26) заміною Грінової функції неупорядкованого кристалу на Грінову функцію ефективного середовища, що визначається когерентним потенціалом [66]. Виконуючи для трансляційно-інваріантного виразу (26) Фур'є-перетвір, можна одержати наступний вигляд для зазначеної складової масового оператора електрон-електронної взаємодії, що описує динамічні флюктуації зарядової та спінової густин:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ee\ i\gamma, i'\gamma'}^{\text{дин}}(\epsilon, \mathbf{k}) = & -\frac{1}{4\pi i N} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' f(\epsilon') \sum_{i_1, i_2, \mathbf{k}'} \sigma_{i_1 \gamma_1, i_2 \gamma_2}^{(2) i\gamma, i_2 \gamma_2}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \mathbf{k}') \times \\ & \times \left(\tilde{G}_{i_1 \gamma_1, i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\epsilon', \mathbf{k}') - \tilde{G}_{i_2 \gamma_2, i_1 \gamma_1}^{aa^+*}(\epsilon', \mathbf{k}') \right) + \frac{1}{4\pi^2 N^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_2 \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \\ i_1, i_2, i_3, i_4, i_5, i_6}} \sigma^{(2) i_1 \gamma, i_3 \gamma_3}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \{f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \times \\
& \times \left(\tilde{G}_{i_5 \gamma_5, i_2 \gamma_2}^{aa^*}(\varepsilon + \varepsilon_2 - \varepsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \tilde{G}_{i_1 \gamma_1, i_4 \gamma_4}^{aa^+}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) - \right. \\
& \left. - \tilde{G}_{i_2 \gamma_2, i_5 \gamma_5}^{aa^+}(\varepsilon + \varepsilon_2 - \varepsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \tilde{G}_{i_4 \gamma_4, i_1 \gamma_1}^{aa^*}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) \right) \times \\
& \times \left(\tilde{G}_{i_6 \gamma_6, i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2) - \tilde{G}_{i_3 \gamma_3, i_6 \gamma_6}^{aa^*}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2) \right) + f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \times \\
& \times \left(\tilde{G}_{i_2 \gamma_2, i_5 \gamma_5}^{aa^+}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) - \tilde{G}_{i_5 \gamma_5, i_2 \gamma_2}^{aa^*}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right) \times \\
& \times \left(\tilde{G}_{i_1 \gamma_1, i_4 \gamma_4}^{aa^+}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) \tilde{G}_{i_6 \gamma_6, i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) - \right. \\
& \left. - \tilde{G}_{i_4 \gamma_4, i_1 \gamma_1}^{aa^*}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) \tilde{G}_{i_3 \gamma_3, i_6 \gamma_6}^{aa^*}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) \right) \} \tilde{v}_{i_6 \gamma_6, i_1 \gamma_1}^{(2) i_4 \gamma_4, i_5 \gamma_5}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}, \mathbf{k}_2),
\end{aligned} \tag{28}$$

де

$$\begin{aligned}
\sigma^{(2) i_1 \gamma, i_3 \gamma_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= \frac{1}{N} \sum_{n_1, n_2, n_3, n} \sigma^{(2) n_1 \gamma, n_3 \gamma_3} e^{i \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{n_1 i_1}} e^{i \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{n_2 i_2}} e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{n_1 i_1}} e^{-i \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_{n_3 i_3}}, \\
\tilde{G}_{i_1 \gamma_1, i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\varepsilon, \mathbf{k}) &= \sum_{n_2} \tilde{G}_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\varepsilon) e^{-i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{n_1 i_1} - \mathbf{R}_{n_2 i_2})}.
\end{aligned}$$

Тут $\mathbf{R}_{ni} = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i$, де \mathbf{r}_n — радіус-вектор примітивної елементарної комірки кристалу; $\boldsymbol{\rho}_i$ — радіус-вектор вузла підгратниці в примітивній комірниці, індекс γ визначається номером енергетичної зони і проекцією спіну ($\gamma = (\gamma, \sigma)$).

Статичні флюктуації зарядової та спінової густин будуть описуватися різницею між масовим оператором (26) та його трансляційно-інваріантною складовою, тобто:

$$\Sigma_{ee}^{ct}{}_{ni\gamma, ni'\gamma'} \equiv \Sigma_{ee}{}_{ni\gamma, ni'\gamma'} - \tilde{\Sigma}_{ee}{}_{ni\gamma, ni'\gamma'}. \tag{29}$$

Записуючи у (28) замість γ індекси енергетичної зони (γ) та проекції спіну (σ), можна розділити спінові (магнетні) й зарядові флюктуації, що визначаються взаємодією на різних вузлах. Для цього врахуємо діагональність Грінової функції по індексах спінів:

$$\tilde{G}_{i_1 \gamma_1, i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\varepsilon, \mathbf{k}) \equiv \tilde{G}_{i_1 \gamma \sigma, i_2 \gamma' \sigma'}^{aa^+}(\varepsilon, \mathbf{k}) \delta_{\sigma \sigma'}, \quad (\gamma = (\gamma, \sigma)), \tag{30}$$

та введемо наступні означення:

$$\tilde{G}_{i_1 \gamma, i_2 \gamma'}^{aa^+ z}(\varepsilon, \mathbf{k}) \equiv \tilde{G}_{i_1 \gamma \sigma, i_2 \gamma' \sigma}^{aa^+}(\varepsilon, \mathbf{k}) + \tilde{G}_{i_1 \gamma - \sigma, i_2 \gamma' - \sigma}^{aa^+}(\varepsilon, \mathbf{k}), \tag{31}$$

$$\tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+c}(\epsilon, \mathbf{k}) \equiv \tilde{G}_{i\gamma\sigma,i'\gamma'\sigma}^{aa^+}(\epsilon, \mathbf{k}) - \tilde{G}_{i\gamma-\sigma,i'\gamma'-\sigma}^{aa^+}(\epsilon, \mathbf{k}), \quad (32)$$

$$\tilde{G}_{i\gamma\sigma,i'\gamma'\sigma}^{aa^+}(\epsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+z}(\epsilon, \mathbf{k}) + \tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+c}(\epsilon, \mathbf{k}) \right), \quad (33)$$

$$\tilde{G}_{i\gamma-\sigma,i'\gamma'-\sigma}^{aa^+}(\epsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+z}(\epsilon, \mathbf{k}) - \tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+c}(\epsilon, \mathbf{k}) \right). \quad (34)$$

Тут вираз для $\tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+z}(\epsilon, \mathbf{k})$ відповідає зарядовій густині електронів, а $\tilde{G}_{i\gamma,i'\gamma'}^{aa^+c}(\epsilon, \mathbf{k})$ — спіновій густині.

Використовуючи формули (30)–(34), запишемо у виразі (28) перший доданок для масового оператора, що описує внесок в енергію електрона, який пов'язаний з розповсюдженням в кристалі хвиль зарядової та спінової густин в наближенні Хартрі–Фока:

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}_{ee\ i\gamma\sigma,i'\gamma'\sigma}^{\text{дин}(1)}(\mathbf{k}) = & -\frac{1}{4\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' f(\epsilon') \sum_{i,i_2,\mathbf{k}'} \left[\tilde{v}_{i_1\gamma_1\sigma_1,i'\gamma_1'\sigma_1}^{(2)i\gamma\sigma,i_2\gamma_2\sigma_1}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \mathbf{k}, \mathbf{k}') \times \right. \\ & \times \left(\text{Im} \left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_2\gamma_2}^{aa^+z}(\epsilon', \mathbf{k}') \right) + \text{Im} \left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_2\gamma_2}^{aa^+c}(\epsilon', \mathbf{k}') \right) \right) + \\ & \left. + \tilde{v}_{i_1\gamma_1-\sigma_1,i'\gamma_1'-\sigma_1}^{(2)i\gamma-\sigma,i_2\gamma_2-\sigma_1}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \mathbf{k}, \mathbf{k}') \times \left(\text{Im} \left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_2\gamma_2}^{aa^+z}(\epsilon', \mathbf{k}') \right) - \text{Im} \left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_2\gamma_2}^{aa^+c}(\epsilon', \mathbf{k}') \right) \right) \right]. \quad (35) \end{aligned}$$

Аналогічним чином одержується й другий доданок у (28), пов'язаний з виходом за рамки наближення Хартрі–Фока:

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}_{ee\ i\gamma\sigma,i'\gamma'\sigma}^{\text{дин}(2)}(\epsilon, \mathbf{k}) = & \frac{1}{32\pi^2 N^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_2 \times \\ & \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \\ s_1, s_2, s_3, \\ i_1, i_2, i_3, i_4, i_5, i_6}} \left[\tilde{v}_{i_2\gamma_2s_2,i_1\gamma_1s_1}^{(2)i\gamma\sigma,i_3\gamma_3s_3}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \{f(\epsilon_1)f(\epsilon_2) \times \right. \\ & \times \left[\left(\tilde{G}_{i_5\gamma_5,i_2\gamma_2}^{aa^+z}(\epsilon + \epsilon_2 - \epsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + 2s_2 \tilde{G}_{i_5\gamma_5,i_2\gamma_2}^{aa^+c}(\epsilon + \epsilon_2 - \epsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right) \times \right. \\ & \times \left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_4\gamma_4}^{aa^+z}(\epsilon_1, \mathbf{k}_1) + 2s_1 \tilde{G}_{i_1\gamma_1,i_4\gamma_4}^{aa^+c}(\epsilon_1, \mathbf{k}_1) \right) - \\ & - \left(\tilde{G}_{i_2\gamma_2,i_5\gamma_5}^{aa^+z}(\epsilon + \epsilon_2 - \epsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + 2s_2 \tilde{G}_{i_2\gamma_2,i_5\gamma_5}^{aa^+c}(\epsilon + \epsilon_2 - \epsilon_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right) \times \\ & \times \left. \left. \left(\tilde{G}_{i_4\gamma_4,i_1\gamma_1}^{aa^+z}(\epsilon_1, \mathbf{k}_1) + 2s_1 \tilde{G}_{i_4\gamma_4,i_1\gamma_1}^{aa^+c}(\epsilon_1, \mathbf{k}_1) \right) \right] \times \right. \\ & \times \left[\left(\tilde{G}_{i_6\gamma_6,i_3\gamma_3}^{aa^+z}(\epsilon_2, \mathbf{k}_2) + 2s_3 \tilde{G}_{i_6\gamma_6,i_3\gamma_3}^{aa^+c}(\epsilon_2, \mathbf{k}_2) \right) - \right. \\ & - \left. \left. \left(\tilde{G}_{i_3\gamma_3,i_6\gamma_6}^{aa^+z}(\epsilon_2, \mathbf{k}_2) + 2s_3 \tilde{G}_{i_3\gamma_3,i_6\gamma_6}^{aa^+c}(\epsilon_2, \mathbf{k}_2) \right) \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +f(\varepsilon_1)f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \left[\left(\tilde{G}_{i_2\gamma_2, i_5\gamma_5}^{aa^+z}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + 2s_2 \tilde{G}_{i_2\gamma_2, i_5\gamma_5}^{aa^+c}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right) - \right. \\
& \quad \left. - \left(\tilde{G}_{i_5\gamma_5, i_2\gamma_2}^{aa^+z}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + 2s_2 \tilde{G}_{i_5\gamma_5, i_2\gamma_2}^{aa^+*c}(\varepsilon_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right) \right] \times \\
& \quad \times \left[\left(\tilde{G}_{i_1\gamma_1, i_4\gamma_4}^{aa^+z}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) + 2s_1 \tilde{G}_{i_1\gamma_1, i_4\gamma_4}^{aa^+c}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) \right) \times \right. \\
& \quad \times \left(\tilde{G}_{i_6\gamma_6, i_3\gamma_3}^{aa^+z}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) + 2s_3 \tilde{G}_{i_6\gamma_6, i_3\gamma_3}^{aa^+c}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) \right) - \\
& \quad \left. - \left(\tilde{G}_{i_4\gamma_4, i_1\gamma_1}^{aa^+z}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) + 2s_1 \tilde{G}_{i_4\gamma_4, i_1\gamma_1}^{aa^+*c}(\varepsilon_1, \mathbf{k}_1) \right) \left(\tilde{G}_{i_3\gamma_3, i_6\gamma_6}^{aa^+z}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + 2s_3 \tilde{G}_{i_3\gamma_3, i_6\gamma_6}^{aa^+*c}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon, \mathbf{k}_2) \right) \right] \tilde{v}_{i_6\gamma_6 s_3, i'\gamma'\sigma}^{(2) i_4\gamma_4 s_1, i_5\gamma_5 s_2}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}, \mathbf{k}_2), \quad (36)
\end{aligned}$$

де s_1, s_2, s_3 , аналогічно спіновим індексам, набувають значень $\pm 1/2$.

Таким чином, вищенаведені вирази (28)–(36) дозволяють не лише розглянути окремо статичні та динамічні складові масового оператора електрон-електронної взаємодії, але й виділити внески в нього від флюктуацій зарядової та спінової густин.

2. ЗВ'ЯЗОК АТОМОВОГО Й МАГНЕТНОГО ПОРЯДКІВ З ЕЛЕКТРОННОЮ СТРУКТУРОЮ НЕВПОРЯДКОВАНИХ СТОПІВ

Зміни фізичних властивостей неупорядкованих кристалічних систем при фазових переходах лад–безлад вивчаються вже понад шістьдесят років. Ще в 50-х роках минулого століття передбачено, що далеке атомове впорядкування в стопі заміщення має призводити до зміни енергетичного спектру електронів, а саме, до виникнення у спектрі енергетичної щільності, пов'язаної з розщепленням енергетичних зон [78, 79]. Подальші дослідження впливу атомового впорядкування на енергетичний спектр електронів і електропровідність стопів виконано в роботах [60, 80–85]. Встановлено, що поведінка електропровідності [60, 80, 84], а також характер атомового впорядкування [85] суттєво залежать від положення рівня Фермі по відношенню до зазначеної квазищільності. При певних значеннях електронної концентрації стопу, коли рівень Фермі знаходиться поза межами області квазищільності, електропровідність системи зі зростанням атомового порядку збільшується, а коли рівень Фермі потрапляє в область квазищільності, то електропровідність зменшується. Однак, зазначені дослідження виконано в одноелектроннім наближенні без урахування електрон-електронної взаємодії. Це означає, що автори згаданих робіт знехтували ефектами сильних електронних кореляцій, пов'язаних з виникненням локалізованих магнетних моментів на вузлах кристалічної ґратниці та кореляціями у їхній орієнтації на різних вузлах, що обумовлюють той

чи інший тип магнетного порядку в системі.

Для опису систем з сильними електронними кореляціями застосовуються різні варіанти і граничні випадки моделю Хаббарда, яких докладно розглянуто в оглядах [86–88]. Клясичний модель Хаббарда [89–91] виходить з того, що електрони в кристалі одночасно проявляють схильність як до колективізації за рахунок перекриття їхніх хвильових функцій на сусідніх вузлах кристалічної ґратниці, так і до локалізації через їх Кульонове відштовхування на одному вузлі. Так, в однозонній моделю Хаббарда Гамільтоніян системи з сильними електронними кореляціями можна представити у вигляді

$$H = \sum_{\sigma,(in)} \varepsilon_{in} n_{in\sigma} + \sum_{\substack{\sigma,(in), \\ (jm) \neq (in)}} h_{injm} a_{in\sigma}^+ a_{jm\sigma} + \sum_{\substack{\sigma,(in), \\ \sigma \neq \sigma}} U_{in} n_{in\sigma} n_{in\sigma'} + \sum_{\substack{\sigma,(in),\sigma', \\ (jm) \neq (in)}} U_{injm} n_{in\sigma} n_{jm\sigma'}, \quad (37)$$

де $a_{in\sigma}^+$, $a_{in\sigma}$ — оператори народження та знищення електрона в стані, що описується узагальненим вектором Ваньє $|in\sigma\rangle$; i — номер підґратниці; n — номер вузла на підґратниці; $\sigma = \pm 1/2$ — значення проєкції спіну електрона на вісь z ; $n_{in\sigma} = a_{in\sigma}^+ a_{in\sigma}$ — оператор числа електронів у стані $|in\sigma\rangle$. У формулі (37) ε_{in} — діагональний матричний елемент одноелектронного Гамільтоніяна, що приймає незалежні від номера вузла значення $\varepsilon_{in} = \varepsilon_0$; h_{injm} — недіагональний матричний елемент Гамільтоніяна (інтеграл перескоку), який часто вважається ненульовим лише для найближчих сусідів; $U_{in} = U_0$ — потенціал Кульонове відштовхування електронів з протилежно напрямленими спінами на одному вузлі; U_{injm} — потенціал Кульової взаємодії електронів на сусідніх вузлах.

Це найпростіший модель, який описує конкуренцію між колективізацією та локалізацією електронів в кристалі. Зазначений підхід дозволяє дослідити механізми утворення локалізованих магнетних моментів за рахунок електронів провідности, а також магнетні фазові перетворення і перехід метал–діелектрик у сильнокорельованих системах. Однак дана задача має точний розв’язок лише для випадку одновимірного кристалу в однозонній моделю Хаббарда [92], а також для одновимірного кристалу в узагальненій моделю Хаббарда з урахуванням міжзонної взаємодії [93]. Для випадку реальних тривимірних кристалів точного розв’язку цієї задачі не існує. Однак в наближенні «середнього корельованого поля», запропонованім у роботах [94–96], багатоелектронний Гамільтоніян моделю Хаббарда (37) суттєво спрощується шляхом зведення його до суми одночастинкових Гамільтоніянів заміною

$$\sum_{\sigma,(in),\sigma \neq \sigma} U_{in} n_{in\sigma} n_{in\sigma'} \approx \sum_{\sigma,(in)} \varepsilon_{in\sigma} n_{in\sigma}, \quad (38)$$

при цьому діагональні матричні елементи $\varepsilon_{in\sigma} = U_{in} \bar{n}_{in\sigma'}$ Гамільто-

ніяна вважаються величинами, які набувають випадкових значень в залежності від квантово-механічного середнього $\hat{p}_{in\sigma}$ оператора числа електронів $n_{in\sigma}$ на вузлі (in) зі спіном σ . Такий підхід дозволяє врахувати основні багаточастинкові ефекти: виникнення льокалізованих магнетних моментів і кореляцію в їхній орієнтації на вузлах кристалічної ґратниці в чистих металах і повністю впорядкованих стопах.

Врахувати електрон-електронну, електрон-фононну взаємодії, а також парні кореляції в розподілі атомів по вузлах кристалічної ґратниці та в орієнтації їхніх льокалізованих магнетних моментів в системах з сильними електронними кореляціями дозволяє метода кластерного розвинення для Грінових функцій, розроблена в роботах [32, 60, 61, 84, 97, 98]. На основі зазначеної методи в роботі [99] досліджено взаємний вплив атомового і магнетного порядку у стопі Fe–Ti в узагальненій моделю Хаббарда на випадок декількох зон для кристалу з випадковим розташуванням атомів різного сорту на вузлах кристалічної ґратниці. Автори пояснили природу стабільності впорядкованої інтерметалідної фази Fe–Ti положенням рівня Фермі в області енергетичної квазищільнини в спектрі електронів та показали, що атомове та магнетне впорядкування в системі не реалізуються одночасно.

Розглянемо детальніше зв'язок атомового та магнетного впорядкування з електронною структурою неупорядкованих систем на прикладі стопу Fe–Co, який широко використовується як технологічний магнетом'який матеріал з відносно великими значеннями магнетного насичення і температури Кюрі.

Особливості електричних і магнетних властивостей стопів Fe–Co зазвичай пояснюються в літературі наявністю впорядкованих фаз [100–103] системи (див. її фазову діаграму [104]). Наприклад, в експериментальній роботі [103] досліджувалися як атомовий, так і магнетний фазові переходи в еквіатомовім стопі FeCo. Тут атомове впорядкування (перехід типу лад–безлад) і магнетний фазовий (феромагнетик–парамагнетик) перехід системи проаналізовано, виходячи з даних мірювання електроопору в області температур 900–1300 К. Автори пояснили аномалії високотемпературної залежності електроопору стопу структурними змінами (ОЦК–ГЦК) кристалічної ґратниці стопу FeCo. Однак при аналізі електропровідності системи у роботі [103] не бралися до уваги такі фактори впливу як наявність сильних електронних кореляцій і зміна енергетичного спектру зі зростанням температури. В експериментальній роботі [100] зміни в електропровідності еквіатомового стопу FeCo в області температури фазового переходу лад–безлад пояснено зменшенням часу релаксації електронів з початком атомового впорядкування і збільшенням ефективного числа електронів провідності зі зростанням порядку в системі. Нижче температури переходу лад–безлад

обидві зазначені величини збільшуються зі встановленням далекого атомового порядку. Подібна оцінка електропровідності є лише якісною, оскільки не враховано зонну структуру, міжзонне розсіювання електронів, ефекти міжатомових і магнетних кореляцій, які є вагомими у формуванні фізичних властивостей стопу FeCo.

В роботі [105] вперше показано експериментально, що атомовий порядок типу B2 у загартованім стопі Fe_{0,5}Co_{0,5} займає лише $\cong 10\%$ його об'єму. Показано також, що атомовий порядок в системі Fe–Co не відіграє суттєвої ролі у формуванні її магнетних властивостей.

Цей експериментальний факт підтверджується в роботах [74, 106]. Так, в [74] методом кластерного розвинення для Грінювих функцій в моделю сильного зв'язку [32, 60, 61, 84, 97, 98] досліджено взаємний вплив атомового і магнетного порядків у стопі Fe_{0,5}Co_{0,5}.

На рисунку 1 представлено залежність рівноважних значень параметра парних магнетних кореляцій ϵ_m від величини параметра атомового близького порядку ϵ_a . Видно, що зміна параметра парних міжатомових кореляцій ϵ_a (при параметрі далекого атомового впорядкування $\eta_a = 0$) від значення $-0,25$, що відповідає максимальному близькому порядку, до значення $0,25$, що відповідає повному атомовому розшаруванню, слабо впливає на величину рівноважного параметра парних магнетних кореляцій ϵ_m . На рисунку 1 маркером позначено рівноважне значення параметра парних магнетних кореляцій для системи з далеким атомовим порядком $\eta_a = 0,9$ ($\epsilon_a = 0$). Як видно, встановлення далекого атомового порядку призвело б до пригнічення магнетних кореляцій у стопі Fe_{0,5}Co_{0,5}. Проте, вільна енергія цього стану виявляється вищою за енергію стану з близьким атомовим порядком, тобто в данім стопі магнетне впорядкування перешкоджає максимальному атомовому впорядкуванню. Це узгоджується з передбаченими в роботі [107] ефектами вза-

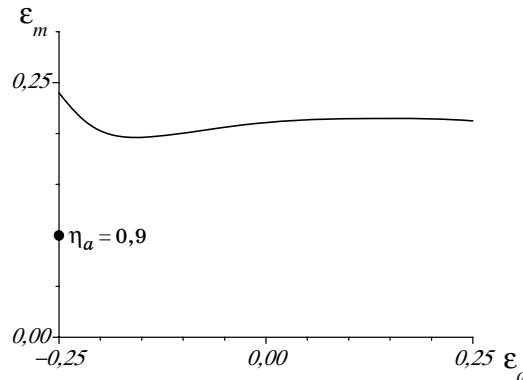


Рис. 1. Залежність рівноважних значень параметра парних магнетних кореляцій від величини параметра атомового близького порядку.

ємного впливу атомового і магнетного порядків у бінарних стопах.

Дослідження кристалічної структури та магнетних властивостей системи Fe–Co виконані в роботах [21, 22, 108–112]. Так, у роботі [108], використовуючи наближення когерентного потенціалу встановлений зв'язок магнетизму з кристалічною структурою стопів Fe–Co. Для стопу Fe_{0,15}Co_{0,85} досліджено фазовий перехід з ОЦК-структури в ГЦУ, результати добре узгоджуються з експериментальною фазовою діаграмою стопу. У роботі [108] показано, що у збагачених Fe неупорядкованих стопах магнетизм робить більш стійкішою ОЦК-фазу по відношенню до щільно упакованих ГЦК- і ГЦУ-фаз. Магнетизм даної системи також сприяє встановленню частково впорядкованої фази відносно неупорядкованого ОЦК-стопу. Зазначений зв'язок між магнетизмом і фазовою стійкістю стопів Fe–Co проаналізовано в спин-поляризованім канонічній моделі *d*-зони. В даній роботі застосовано узагальнене на випадок багатьох підґратниць наближення когерентного потенціалу у зв'язку з методом лінійних МТ-орбіталей у наближенні атомових сфер.

Як впливає з вищезазначеного, атомове та магнетне впорядкування стопів тісно пов'язані зі зміною їхньої електронної структури [32, 60, 61, 78–80, 84, 97, 98, 113–123]. Для якісного дослідження впливу атомового впорядкування на енергетичний спектр електронів скористаємось виразом для густини електронних станів в розрахунку на один атом [60, 61]:

$$g(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi N_V} \text{Im Sp} \langle G(\varepsilon) \rangle = -\frac{2}{\pi N_V} \text{Im} \sum_{\gamma_i \mathbf{k}} \langle G \rangle_{\mathbf{k}}^{\gamma_i \gamma_i}, \quad (39)$$

де $\langle G \rangle_{\mathbf{k}}$ — конфігураційно усереднена Грінова функція в *k*-представленні, яка описується рівнянням

$$\langle G \rangle_{\mathbf{k}} = \tilde{G}_{\mathbf{k}} + \tilde{G}_{\mathbf{k}} \langle T \rangle_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\mathbf{k}}, \quad (40)$$

де $\langle T \rangle_{\mathbf{k}}$ — конфігураційно усереднена *T*-матриця розсіяння електронів [7, 60]. Для врахування парних міжатомових кореляцій достатньо обмежитись у виразі для *T*-матриці парним наближенням розсіяння, тобто врахувати при її кластернім розвиненні тільки процеси розсіяння електронів на кластерах з двох атомів (процесами розсіяння на кластерах з трьох і більше атомів можна знехтувати, враховуючи малість їхнього внеску) [60, 61]:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_{\mathbf{k}}^{i_1 i_2} &= \sum_{(jm) \neq (i_1 0)} (A_{0m}^{i_1 j})^{-1} (x_{i_1} x_j y_{i_1} y_j a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} + \varepsilon_{0m}^{i_1 j}) \times \\ &\times \left\{ \left[x_{i_1} - y_{i_1} + x_{i_1} y_{i_1} (x_j - y_j) a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} \right] a_{0m}^{i_1 j} a_{m0}^{j i_1} (t_{i_1 0}^B - t_{i_1 0}^A) \delta_{i_1 i_2} + \right. \end{aligned}$$

$$+ \left[1 - x_i x_j y_i y_j (a_{0m}^{i,j} a_{m0}^{j,i})^2 \right] a_{0m}^{i,j} (t_{j0}^B - t_{j0}^A) e^{[ik \cdot (r_m + \rho_{i_2} - \rho_{i_1})]} \delta_{j i_2} \}, \quad (41)$$

де x_i, y_i — концентрації компонентів стопу на підґратниці i , які залежать від параметра далекого атомового порядку η_a [32]; $\varepsilon_{0m}^{i,j}$ — параметер парних міжатомових кореляцій; решта величин у виразі (41) є матрицями по відношенню до індексів енергетичних зон γ_1, γ_2 і не залежать від $\varepsilon_{0m}^{i,j}$.

Рівень Фермі ε_F в енергетичнім спектрі електронів (39) при $T = 0$ К визначається з рівняння:

$$xZ^A + yZ^B = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (42)$$

де Z^A, Z^B — числа електронів на атом компонентів A, B стопу відповідно; x, y — концентрації компонентів A, B стопу.

Розглянемо однозонний модель неупорядкованого стопу з експоненціальним зменшенням інтегралів перескоку h_{nm} (3) із збільшенням відстані між вузлами n, m . Зображення Фур'є інтегралів перескоку h_{nm} має вигляд:

$$h_k = W [1 + (kR_0)^2]^{-1}, \quad W < 0, \quad (43)$$

де R_0 — характерна довжина згасання інтеграла перескоку.

Густина електронних станів в цій моделю має вигляд [32, 60]:

$$g(\varepsilon) = g_{\text{нкл}}(\varepsilon) + \delta g(\varepsilon), \quad (44)$$

де перша складова в правій частині (44) описує густину електронних станів в наближенні когерентного потенціалу:

$$g_{\text{нкл}}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \tilde{G}_{00}. \quad (45)$$

Друга складова в правій частині (44) описує поправку до густини електронних станів, що пов'язана з внеском процесів розсіяння електронів на кластерах з двох атомів:

$$\begin{aligned} \delta g(\varepsilon) = & -\frac{xy}{16\pi} \left[\frac{W\delta}{\varepsilon(\varepsilon - \delta)} \right]^2 \frac{1}{\varepsilon - \sigma'} \left(\frac{\Omega_0}{R_0^3} \right)^2 \times \\ & \times \sum_i C_i \alpha_i \frac{1}{(k'_0 r_i)^2} \left[4(b'_0)^2 \sin(2k'_0 r_i) + k'_0 r_i ((b'_0)^2 + 1) \cos(2k'_0 r_i) \right] \exp(-2k''_0 r_i), \end{aligned}$$

$$b_0 = \sqrt{\frac{W}{\varepsilon - \sigma} - 1}, \quad k_0 = b_0 / R_0,$$

$$\delta = v_B - v_A, \quad \sigma = \sigma' + i\sigma'', \quad b_0 = b_0' + ib_0'', \quad k_0 = k_0' + ik_0''. \quad (46)$$

У формулі (46) C_i, r_i, α_i — відповідно координаційне число, радіус і параметер близького порядку за Каулі для i -ї координаційної сфери; Ω_0 — об'єм, що припадає на один атом; $k_0' = k_0'(\varepsilon)$ — ефективне хвильове число для електронів у стопі.

В області значень енергії ε , що відповідає

$$k_0'(\varepsilon)r_1 \approx \pi, \quad (47)$$

множник при α_1 у формулі (46) є позитивним. Це означає, що близький порядок атомів у першій координаційній сфері ($\alpha_1 < 0$) призводить до зменшення густини електронних станів в області значень енергії (47). Тому можна зробити висновок, що на кривій енергетичної залежності густини станів в області енергій (47), за яких ефективний хвильовий вектор електрона знаходиться в області межі Бріллюєнової зони впорядкованого стопу, виникає характерний провал, величина якого з ростом ступеня близького порядку збільшується.

Дослідження впливу близького і далекого атомового впорядкування на енергетичний спектр електронів в багатозонній s - d -моделю виконано в роботі [80], де розглянуто бінарний стоп заміщення з ОЦК-ґратницею.

Наведені на рис. 2 енергетичні залежності густини електронних станів $g(\varepsilon)$ повністю розупорядкованого стопу (суцільна крива) і стопу з близьким порядком (параметер парних міжатомових кореляцій у першій координаційній сфері $\varepsilon_{00}^{12} \equiv \varepsilon_a = -0,05$) демонструють перебудову енергетичного спектру електронів при близьким атомів впорядкуванні. Для порівняння на рис. 2, б наведено аналогічні залежності парціальних густин s -станів $g_s(\varepsilon)$ такого стопу.

З рисунку 2 видно, що при близькому впорядкуванні стопу на кривих енергетичної залежності парціальних густин електронних станів виникають характерні провали, які при подальшому далекому атомовому впорядкуванні утворюють квазищілини. Як видно з рис. 3, де наведена густина електронних станів $g(\varepsilon)$ стопів, що впорядковуються, для різних значень параметра далекого порядку η_a , при встановленні далекого порядку в області зазначених провалів, положення яких в загальному випадку не співпадають, утворюються дві енергетичні квазищілини.

Як показано в роботах [124–126], аналогічний вплив на густину електронних станів систем з сильними електронними кореляціями

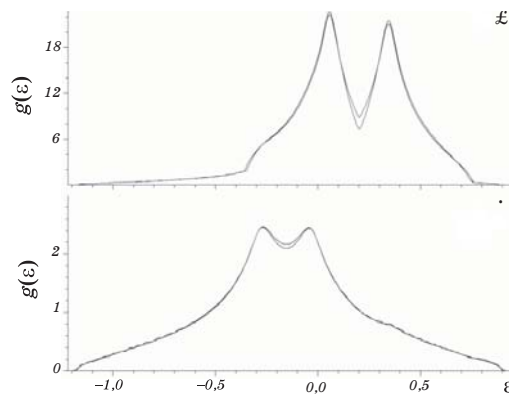


Рис. 2. Енергетична залежність густини електронних станів неупорядкованих стопів.

мають параметри далекого магнетного порядку η_m і параметри парних кореляцій в орієнтації льюкалізованих магнетних моментів ϵ_m .

Антиферромагнетне впорядкування на близьких відстанях ($\epsilon_m < 0$) призводить до провалу на енергетичній залежності густини електронних станів в області Кульонової щілини, який при встановленні далекого антиферромагнетного порядку переходить в енергетичну щілину (у випадку декількох зон — у квазищілину).

В роботах [94–96, 124–126] показано, що магнетний фазовий стан системи визначається положенням рівня Фермі відносно Кульонової щілини, а також відношенням Кульонового потенціалу U_0 до напівширини енергетичного спектру електронів.

На рисунку 4 наведено магнетну фазову діаграму [119], побудо-

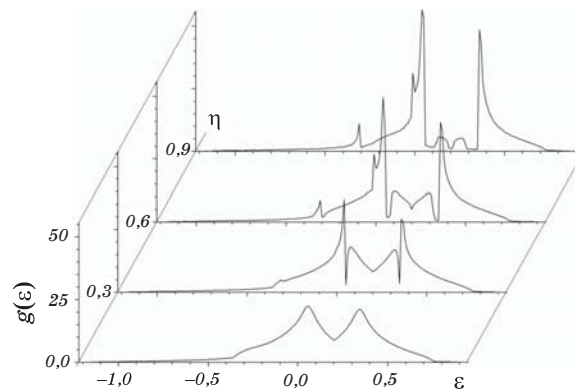


Рис. 3. Енергетична залежність густини електронних станів стопів, що впорядковуються, для різних значень параметра далекого порядку η_a . Параметер парних міжатомових кореляцій $\epsilon_a = 0$.

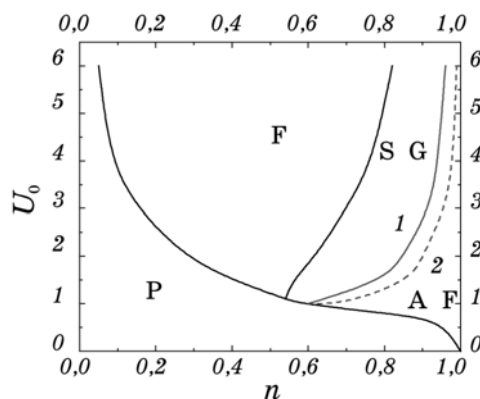


Рис. 4. Фазова діаграма сильнокорельованої системи з реальним законом дисперсії для ОЦК-ґратниці.

вану з використанням значень параметру далекого магнетного порядку (η_m) і параметру парних кореляцій ($\epsilon_{10,20} \equiv \epsilon_m$) в розподілі льюкалізованих магнетних моментів з врахуванням реального закону дисперсії для ОЦК-стопу в однозонній моделю. На фазовій діаграмі в моделю Хаббарда є області, які відповідають хаотичній орієнтації льюкалізованих магнетних моментів (SG) і антиферромагнетному впорядкуванню (AF). Пунктирна лінія на фазовій діаграмі відповідає роздільчій межі магнетно-невпорядкованої фази і фази з далеким магнетним порядком. Ця границя визначається значеннями параметрів $\epsilon_m = -0,25$, $\eta_m = 0$, що відповідає $P_{10,20}^{m/m} = 0$ (AF).

При переході в антиферромагнетний стан змінюється симетрія системи (в ОЦК-кристалах виникають дві підґратниці) і параметер $\eta_m \neq 0$. При цьому антиферромагнетна фаза відповідає повністю впорядкованому стану $\eta_m = 1$, за винятком вузької перехідної області по електронній концентрації ($\Delta n \approx 0,05$), де η_m швидко зростає від 0 (лінія 1) до 1 (лінія 2). Феромагнетна фаза (F), а також межа розділу феромагнетної фази і спінового скла визначається умовою $\epsilon_m = 0,25$, $\eta_m = 0$, що відповідає $P_{10,20}^{m/m} = 1$.

На рисунках 5, 6 представлено густину електронних станів $g(E)$ для ОЦК-стопу і рівноважні значення параметрів, розраховані з врахуванням близького й далекого магнетних порядків: на рис. 5 наведено енергетичну залежність густини електронних станів для половинного заповнення енергетичної зони ($n = 1$) і різних параметрів Кульонового відштовхування U_0 , а на рис. 6 — для фіксованого $U_0 = 2$ і різних n . Наведені рівноважні значення льюкалізованих магнетних моментів μ , параметрів далекого порядку η_m і парних

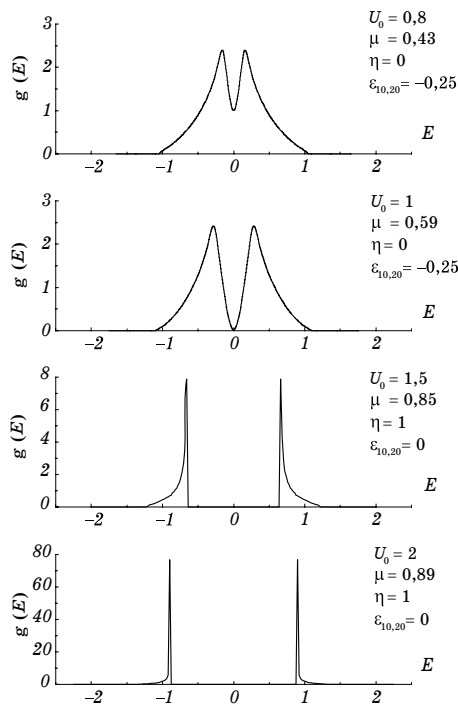


Рис. 5. Енергетична залежність густини електронних станів ($n = 1$) для ОЦК-кристалів з урахуванням кореляцій на близьких і далеких відстанях.

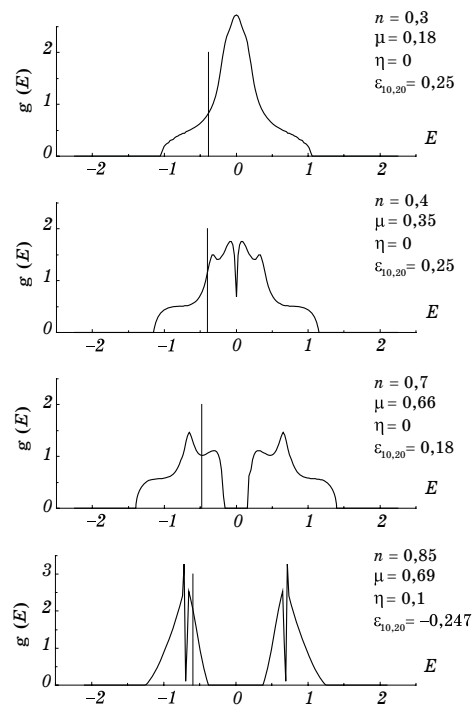


Рис. 6. Енергетична залежність густини електронних станів ($U_0 = 2$) для ОЦК-кристалів з урахуванням кореляцій на близьких і далеких відстанях.

кореляцій в орієнтації магнетних моментів $\epsilon^m \equiv \epsilon_{10,20} \equiv \epsilon_{i_0 j l}^{\mu_i \mu_j}$ знайдено з умови мінімуму вільної енергії F . Розрахунки свідчать про те, що антиферромагнетне впорядкування призводить до зростання провалу (щілини) на енергетичній залежності густини електронних станів, а коли рівень Фермі потрапляє в зазначену область, то стає енергетично вигідним перехід в антиферромагнетну фазу.

Як свідчать розрахунки (рис. 5, 6), при значнім відхилі електронної концентрації n від половинного заповнення зони (а для малих значень Кульонового потенціалу U_0 і при $n \approx 1$), коли рівень Фермі знаходиться на краях енергетичного спектру поза Кульовою щілиною, система перебуває в парамагнетнім (Р) стані (льокалізовані у вузлах кристалічної ґратниці магнетні моменти дорівнюють нулеві). Якщо рівень Фермі лежить в області Кульової щілини (електронна концентрація $n \approx 1$), то за будь-яких значень $U_0 > 0$ стоп знаходиться в антиферромагнетнім стані і є діелектриком. Тобто

стоп перебуває або у феромагнетнім стані ($\epsilon_m > 0$), або у стані спінового скла (магнетне розупорядкування з $\epsilon_m \cong 0$), а рівень Фермі лежить в області піків густини електронних станів, зумовлених Кульоновим розщепленням енергетичного спектру електронів.

Коли рівень Фермі знаходиться в області енергетичної щілини, яка виникає при встановленні як атомового, так і магнетного далеких порядків, має місце перехід метал-діелектрик.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. В. В. Немошкаленко, В. Н. Антонов, *Методы вычислительной физики в теории твердого тела* (Київ: Наукова думка: 1985).
2. В. Кон, *УФН*, **172**, № 3: 336 (2002).
3. R. M. Dreizler and E. K. Gross, *Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-Body Problem* (Berlin: Springer-Verlag: 1990).
4. R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (New York: Oxford Univ. Press: 1989).
5. A. B. Shick and O. N. Mryasov, *Phys. Rev. B*, **67**, No. 17: 172407 (2003).
6. В. В. Немошкаленко, Ю. Н. Кучеренко, *Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах* (Київ: Наукова думка: 1986).
7. Г. Эренрейх, Л. Шварц, *Электронная структура сплавов* (Москва: Мир: 1979).
8. V. Blum and A. Zunger, *Phys. Rev. B*, **70**, No. 15: 155108 (2004).
9. A. Bergman, E. Holmström, A. Niklasson et al., *Phys. Rev. B*, **70**, No. 17: 174446 (2004).
10. N. M. Rosengaard and B. Johansson, *Phys. Rev. B*, **55**, No. 22: 14975 (1997).
11. E. Bruno, F. Mammano, A. Fiorino et al., *Phys. Rev. B*, **77**, No. 15: 155108 (2008).
12. I. A. Abrikosov, A. E. Kissavos, F. Liot et al., *Phys. Rev. B*, **76**, No. 1: 014434 (2007).
13. D. A. Rowlands, A. Ernst, B. L. Györffy et al., *Phys. Rev. B*, **73**, No. 16: 165122 (2006).
14. D. A. Biava, S. Ghosh, D. D. Johnson et al., *Phys. Rev. B*, **72**, No. 11: 113105 (2005).
15. M. Lüders, A. Ernst, M. Däne et al., *Phys. Rev. B*, **71**, No. 20: 205109 (2005).
16. M. d'Avezac and A. Zunger, *Phys. Rev. B*, **78**, No. 6: 064102 (2008).
17. V. Blum, G. L. Hart, M. J. Walorski et al., *Phys. Rev. B*, **72**, No. 16: 165113 (2005).
18. M. Häfner, J. K. Viljas, D. Frustaglia et al., *Phys. Rev. B*, **77**, No. 10: 104409 (2008).
19. Y. D. Kim, Yia-Chung Chang, and M. V. Klein, *Phys. Rev. B*, **48**, No. 24: 17770 (1993).
20. S. K. Bose, O. Jepsen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B*, **48**, No. 7: 4265 (1993).
21. A. Diaz-Ortiz, R. Drautz, M. Fähnle et al., *Phys. Rev. B*, **73**, No. 22: 224208-1 (2006).
22. R. Drautz, A. Diaz-Ortiz, M. Fähnle et al., *Phys. Rev. Lett.*, **93**, No. 6: 067202 (2004).
23. A. V. Ruban, S. Khmelevskiy, P. Mohn et al., *Phys. Rev. B*, **76**, No. 1: 014420

- (2007).
24. A. V. Ruban and H. L. Skriver, *Phys. Rev. B*, **66**, No. 2: 024201 (2002).
 25. B. Ujfalussy, J. S. Faulkner, N. Y. Moghadam et al., *Phys. Rev. B*, **61**, No. 18: 12005 (2000).
 26. P. James, O. Eriksson, B. Johansson et al., *Phys. Rev. B*, **59**, No. 1: 419 (1999).
 27. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, *УФН*, **169**, № 7: 773 (1999).
 28. P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **109**, No. 5: 1492 (1958).
 29. P. W. Anderson, *Comments Solid State Phys.*, **2**, No. 6: 193 (1970).
 30. R. Freedman and I. A. Alertz, *Phys. Rev.*, **15**, No. 4: 2384 (1977).
 31. Р. Эллиот, Дж. Крамхансл, П. Лис, *Теория и свойства случайно неупорядоченных кристаллов и связанных с ними физических систем* (ред. В. Л. Бонч-Бруевич) (Москва: Мир: 1977), с. 11.
 32. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем* (Киев: Наукова думка: 1995).
 33. В. Е. Егорушкин, Ю. А. Хон, *Электронная теория сплавов переходных металлов* (Новосибирск: Наука. Сиб. отд.: 1985).
 34. R. J. Elliott and D. W. Taylor, *Proc. Roy. Soc.*, **A296**, No. 1445: 161 (1967).
 35. J. Koringa, *J. Phys. Chem. Sol.*, **7**, No. 2: 252 (1958).
 36. J. L. Beeby, *Phys. Rev.*, **A135**, No. 1: 130 (1964).
 37. D. W. Taylor, *Phys. Rev.*, **156**, No. 3: 1017 (1967).
 38. P. Soven, *Phys. Rev.*, **156**, No. 3: 809 (1967).
 39. A. A. Mookerjee, *J. Phys. C*, **6**, No. 10: L205 (1973).
 40. S. S. Razee, A. Mookerjee, and R. Prasad, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, No. 19: 3301 (1991).
 41. S. S. Razee, S. S. Rajput, R. Prasad et al., *Phys. Rev. B*, **42**, No. 15: 9391 (1990).
 42. R. Mills and P. Ratanavararaksa, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 10: 5291.
 43. H. W. Diehl and P. L. Leath, *Phys. Rev. B*, **19**, No. 2: 587 (1979).
 44. T. Kaplan and L. J. Gray, *Phys. Rev. B*, **15**, No. 6: 3260 (1977).
 45. L. J. Gray and T. Kaplan, *Phys. Rev. B*, **24**, No. 4: 1872 (1981).
 46. V. Kumar, A. Mookerjee, and V. K. Srivastava, *J. Phys. C*, **15**, No. 9: 1939 (1982).
 47. М. П. Фатеев, *ЛГМФ*, **90**, № 1: 128 (1992).
 48. А. В. Ведяев, *ТМФ*, **31**, № 3: 392 (1977).
 49. А. В. Ведяев, А. Б. Грановский, Е. И. Кондорский и др., *ФТТ*, **21**, № 4: 961 (1979).
 50. А. В. Ведяев, А. Б. Грановский, Е. И. Кондорский и др., *ФТТ*, **20**, № 1: 166 (1978).
 51. В. И. Токарь, И. В. Масанский, *ФММ*, **64**, № 6: 1207 (1987).
 52. И. В. Масанский, В. И. Токарь, *Докл. АН УССР. Сер. А*, № 1: 52 (1987).
 53. F. Ducastelle and F. Gautier, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **6**, No. 11: 2039 (1976).
 54. G. Treglia, F. Ducastelle, and F. Gautier, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **8**, No. 7: 1437 (1978).
 55. F. Gautier, F. Ducastelle, and J. Giner, *Phil. Mag.*, **31**, No. 6: 1373 (1975).
 56. F. Ducastelle and G. Treglia, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **10**, No. 10: 2137 (1980).
 57. A. Bieber and F. Gautier, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**, No. 6: 2061 (1984).
 58. A. Bieber and F. Gautier, *Sol. St. Commun.*, **38**, No. 12: 1219 (1981).
 59. F. Ducastelle, *J. Phys. C*, **7**, No. 10: 1795 (1974).
 60. V. F. Los' and S. P. Repetsky, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**: 1707 (1994).
 61. S. P. Repetsky, Ye. G. Len, and N. V. Chubinsky, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 867 (1999).

62. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, *ФТТ*, **36**, № 1: 94 (1994).
63. F. Sacchetti, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **10**: 801 (1980).
64. V. Christoph and A. L. Kuzemskii, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **120**: K219 (1983).
65. Ю. Ю. Циовкин, А. Н. Волошинский, *ФММ*, **75**, вып. 3: 25 (1993).
66. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *ТМФ*, **131**, № 3: 456 (2002).
67. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *ФММ*, **96**, № 1: 18 (2003).
68. С. П. Репецкий, И. Г. Вышиваная, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 7: 887 (2004).
69. S. P. Repetskii and I. G. Vyshivanaya, *The Physics of Metals and Metallography*, **99**, No. 6: 558 (2005).
70. J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94**, No. 6: 1498 (1954).
71. R. R. Sharma, *Phys. Rev. B*, **19**, No. 6: 2813 (1979).
72. P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18**, No. 3: 365 (1950).
73. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 989 (2006).
74. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 11: 1475 (2006).
75. С. П. Репецкий, И. Г. Вышиваная, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 587 (2007).
76. M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell et al., *Phys. Rev. B*, **61**, No. 19: 12739 (2000).
77. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell et al., *Phys. Rev. B*, **58**, No. 12: R7475 (1998).
78. А. А. Смирнов, *ЖЭТФ*, **17**, № 8: 730 (1947).
79. А. А. Смирнов, *Теория электросопротивления сплавов* (Киев: Изд. АН УССР: 1960).
80. Н. П. Кулиш, С. П. Репецкий, Е. Г. Лень и др., *ФТТ*, **39**, № 3: 401 (1997).
81. V. Velicky, *Phys. Rev.*, **184**, No. 3: 614 (1969).
82. С. И. Машаров, Н. М. Рыбалко, *ФММ*, **40**, № 6: 1133 (1975).
83. С. М. Бородачев, В. А. Волков, С. И. Машаров, *ФММ*, **42**, № 6: 1147 (1976).
84. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *ТМФ*, **91**, № 2: 279 (1992).
85. S. P. Repetsky, T. D. Shatnii, E. G. Len et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 11: 37 (2000).
86. Ю. А. Изюмов, *УФН*, **165**, № 4: 403 (1995).
87. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем* (Москва: Наука: 1987).
88. Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *УФН*, **178**, № 1: 25 (2008).
89. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **A276**, № 2: 238 (1963).
90. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **A277**, № 2: 237 (1964).
91. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **A281**, № 21: 401 (1964).
92. E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.*, **20**, No. 25: 1445 (1968).
93. A. F. Zhuravlev, *J. de Physique IV (France)*, **10**: Pr5 389 (2000).
94. A. N. Andriotis, P. N. Pouloupoulos, and E. N. Economou, *Solid State Commun.*, **39**: 1175 (1981).
95. A. N. Andriotis, E. N. Economou, Li Qiming et al., *Phys. Rev. B*, **47**, No. 15: 9208 (1993).
96. A. N. Andriotis, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**, No. 26: 4505 (1993).
97. В. В. Гаркуша, В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *ТМФ*, **84**, № 1: 91 (1990).
98. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, А. В. Лось, *ТМФ*, **97**, № 2: 304 (1993).

99. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, Т. С. Лень и др., *ФММ*, **93**, № 3: 9 (2002).
100. P. L. Rossiter, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **11**, No. 3: 615 (1981).
101. *Диаграммы состояния двойных металлических систем* (ред. Н. П. Лякишев) (Москва: Машиностроение: 1997), т. 2.
102. J. Orehotsky and K. Schroder, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **4**: 196 (1974).
103. M. S. Seehra and P. Silinsky, *Phys. Rev. B*, **13**, No. 12: 5183 (1976).
104. А. Е. Вол, *Строение и свойства двойных металлических систем* (Москва: Физматгиз: 1962), т. 2.
105. Ю. И. Устиновщиков, Б. Е. Пушкарев, И. Н. Шабанова, А. И. Ульянов, *Металлы*, № 5: 33 (2003).
106. С. П. Репецкий, В. А. Татаренко, И. Н. Мельник и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 6: 771 (2008).
107. А. А. Смирнов, *Обобщенная теория упорядочения сплавов* (Киев: Наукова думка: 1986).
108. I. A. Abrikosov, P. James, O. Eriksson et al., *Phys. Rev. B*, **54**, No. 5: 3380 (1996).
109. A. Diaz-Ortiz, R. Drautz, M. Fähnle et al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **272**, Part 2, Sp. Iss. SI: 780 (2004).
110. M. Fähnle, R. Drautz, F. Lechermann et al., *Physica status solidi (b)*, **242**, No. 6: 1153 (2005).
111. J. M. MacLaren, T. C. Schulthess, W. H. Butler et al., *J. Appl. Phys.*, **85**, No. 8: 4833 (1999).
112. E. Lopez-Chavez and F. L. Castillo-Alvarado, *J. Magn. Magn. Mater.*, **263**: 182 (2003).
113. S. P. Repetsky, Ye. G. Len', and N. V. Chubin'sky, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 867 (1999).
114. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, К. П. Годлевский, *ФТТ*, **36**, № 1: 194 (1994).
115. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, К. П. Годлевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **16**, № 10: 3 (1994).
116. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, А. А. Каленик и др., *Металлофизика*, **14**, № 11: 3 (1992).
117. Н. П. Кулиш, П. В. Петренко, С. П. Репецкий и др., *ФММ*, № 10: 51 (1990).
118. Н. П. Кулиш, П. В. Петренко, С. П. Репецкий и др., *ФТТ*, **32**, № 11: 3185 (1990).
119. Н. П. Кулиш, П. В. Петренко, И. М. Прохоров и др., *УФЖ*, **37**, № 2: 281 (1992).
120. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, А. А. Каленик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **16**, № 12: 33 (1994).
121. Н. П. Кулиш, В. А. Макара, С. П. Репецкий и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **18**, № 12: 13 (1996).
122. Н. П. Кулиш, В. А. Макара, С. П. Репецкий и др., *ФММ*, № 4: 51 (1997).
123. S. P. Repetsky, N. P. Kulish, A. D. Borisov et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 11: 13 (1999).
124. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *Металлофиз. новейшие технол.*, **20**, № 12: 3 (1998).
125. V. F. Los', S. P. Repetsky, T. D. Shatnii et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 12: 3 (1999).
126. S. P. Repetsky, T. D. Shatnii, T. S. Len et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 11: 7 (1999).