

PACSnumbers: 71.10.Fd, 71.20.Be, 71.27.+a, 71.28.+d, 71.55.Jv, 75.10.Lp, 75.30.Kz, 75.40.Cx

Концентрационная зависимость магнитных свойств бинарных ОЦК-сплавов с беспорядком замещения

Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, Т. С. Лень*, Н. В. Ушаков, В. А. Татаренко

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев, Украина*

**Национальный авиационный университет,
просп. Космонавта Комарова, 1,
03058 Киев, Украина*

В рамках обобщённой однозонной модели Хаббарда исследованы концентрационные зависимости магнитных свойств бинарных ОЦК-сплавов с беспорядком замещения. Нарушение трансляционной инвариантности сплава из-за атомного разупорядочения приводит к нарушению электронно-дырочной симметрии, что проявляется в пороговом характере антиферромагнитного упорядочения при половинном заполнении зоны и в асимметрии магнитных фазовых диаграмм сплавов относительно соответствующего значения средней электронной концентрации на один узел ($n = 1$). Установлено, что различный преимущественный порядок заполнения хаббардовских подзон для компонентов сплава А и В с ростом n , определяемый знаком потенциала примесного рассеяния, обуславливает, в общем случае, несимметричность относительно точки $P_0^A = 0,5$ зависимостей магнитных характеристик изовалентных сплавов ($Z_A = Z_B$, $n = \text{const}$) от концентрации компонента А (P_0^A). Несимметричность аналогичных концентрационных зависимостей для сплавов с $Z_A = 1$, $Z_B = 0$ обусловлена связью $n = P_0^A$. Наблюдаемые для таких сплавов концентрационные зависимости локализованных магнитных моментов схожи с зави-

Corresponding author: Evgeniy Georgievich Len
E-mail: len@imp.kiev.ua

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03680 Kyiv, Ukraine*

**National Aviation University, 1 Cosmonaut Komarov Avenue, 03058 Kyiv, Ukraine*

E. G. Len, V. V. Lizunov, T. S. Len, M. V. Ushakov, V. A. Tatarenko,
Concentration Dependence of Magnetic Properties of Binary B.C.C. Alloys with
Substitutional Disorder, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 37, No. 10: 1405–1425
(2015) (in Russian).

симостью от n аналогичной величины для чистого металла, однако характеризуются различными численными значениями для разных компонентов сплава, а также возможностью иной концентрационной зависимости параметров магнитного порядка. Концентрационные зависимости магнитных моментов в сплавах с $Z_A = 2$, $Z_B = 0$, в отличие от других типов сплавов, оказываются в значительной степени симметричными. При этом концентрационная зависимость параметра магнитного порядка является несимметричной из-за нарушения электронно-дырочной симметрии при изменении $n = 2P_0^A$ от 0 до 2.

Ключевые слова: магнитные сплавы, электронная структура, сильно коррелированные электроны, магнитная фазовая диаграмма, локализованные магнитные моменты, концентрационная зависимость.

В рамках узагальненого однозонного Хаббардового моделю досліджено концентраційні залежності магнетних властивостей бінарних ОЦК-стопів із безладом заміщення. Порушення трансляційної інваріантності стопу через атомове розупорядкування призводить до порушення електронно-діркової симетрії, що проявляється в пороговому характері антиферромагнетного впорядкування при половинному заповненні зони та в асиметрії магнетних фазових діаграм стопів відносно відповідного значення середньої електронної концентрації на один вузол ($n = 1$). Встановлено, що різний переважний порядок заповнення Хаббардових підзон для компонентів стопу А і В зі зростанням n , який визначається знаком потенціалу домішкового розсіяння, зумовлює в загальному випадку несиметричність відносно точки $P_0^A = 0,5$ залежностей магнетних характеристик ізовалентних стопів ($Z_A = Z_B$, $n = \text{const}$) від концентрації компонента А (P_0^A). Несиметричність аналогічних концентраційних залежностей для стопів із $Z_A = 1$, $Z_B = 0$ зумовлено зв'язком $n = P_0^A$. Спостережувані для таких стопів концентраційні залежності локалізованих магнетних моментів є схожими із залежністю від n аналогічної величини для чистого металу, однак характеризуються різними числовими значеннями магнетних моментів для різних компонентів стопу, а також можливістю іншої концентраційної залежності параметрів магнетного порядку. Концентраційні залежності магнетних моментів у стопах із $Z_A = 2$, $Z_B = 0$, на відміну від інших типів стопів, виявляються значною мірою симетричними. При цьому концентраційна залежність параметра магнетного порядку є несиметричною через порушення електронно-діркової симетрії при зміні $n = 2P_0^A$ від 0 до 2.

Ключові слова: магнетні стопи, електронна структура, сильно корельовані електрони, магнетна фазова діаграма, локалізовані магнетні моменти, концентраційна залежність.

The concentration dependences of the magnetic properties of binary b.c.c. alloys with substitutional disorder are investigated within the scope of the generalized single-band Hubbard model. The breaking of alloys' translation invariance because of the atomic disorder leads to a violation of electron-hole symmetry, which results in both the threshold character of antiferromagnetic ordering at half filling and the asymmetry of alloys' magnetic phase dia-

grams relative to corresponding value of average electron density per one site ($n = 1$). As found, a different advantageous order for filling the Hubbard subbands of the alloy components, A and B, with n increasing, which is determined by sign of scattering potential of impurity, in the general case, results in an asymmetry (relative to point $P_0^A = 0.5$) of dependences of magnetic characteristics on the concentration P_0^A of component A in isovalent alloys ($Z_A = Z_B$, $n = \text{const}$). The asymmetry of the same concentration dependences for the alloys with $Z_A = 1$, $Z_B = 0$ is caused by the relationship $P_0^A = n$. For these alloys, the observed concentration dependences of the localized magnetic moments are similar to the dependence of analogous one for pure metal, but with differences in the values of the magnetic moments for different alloy components and with the possibility of a distinct concentration dependence of magnetic order parameter. The concentration dependences of magnetic moments in alloys with $Z_A = 1$, $Z_B = 2$, as opposed to other types of alloys, are symmetric to a large degree. However, the concentration dependence of magnetic order parameter is asymmetric due to the violation of electron-hole symmetry with $n = 2P_0^A$ changing from 0 to 2.

Key words: magnetic alloys, electronic structure, strongly correlated electrons, magnetic phase diagram, localized magnetic moments, concentration dependence.

(Получено 3 сентября 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии постоянно увеличивают спрос на новые материалы, радикально изменяющие свои свойства при относительно небольших изменениях их внутренних параметров или внешних условий. В этом аспекте одними из наиболее перспективных систем являются системы с сильными электрон-электронными корреляциями, в которых с изменением температуры, внешнего магнитного поля, концентрации электронов и других параметров наблюдается широкий спектр фазовых переходов (включая квантовые), например, между различными магнитоупорядоченными и неупорядоченными состояниями, переходы из металлического в диэлектрическое или сверхпроводящее состояния, а также иные уникальные физические явления, обусловленные особенностями зарядового и спинового транспорта, взаимным влиянием параметров магнитного, зарядового и орбитального упорядочений и пр. [1–5]. Свойства многих таких систем зависят от соотношения ширины зон и энергий кулоновского отталкивания электронов, уровней заполнения последними зон и значений плотности состояний на уровне Ферми. Эти параметры на практике чаще всего изменяют путём замены одних атомов в сплавах и соединениях на другие, таким образом изменяя концентрацию электронов и вводя дополнительный механизм их рассеяния на отклонениях кристаллического

потенциала системы от потенциала исходной матрицы. Такие отклонения могут быть как хаотичными, так и коррелированными из-за ближнего и дальнего атомных порядков. В этой связи исследование взаимосвязи межэлектронных корреляций и атомного (раз)упорядочения, а также совместного их влияния, в том числе через изменение концентрации компонентов, на электронные свойства сплавов оказывается актуальной задачей не только с фундаментальной, но и с прикладной точек зрения.

В настоящее время одними из наиболее перспективных методов расчёта электронных свойств систем с сильными электронными корреляциями являются методы, основанные на теории динамического среднего поля и их кластерные обобщения, учитывающие нелокальные эффекты электрон-электронного взаимодействия [6–8]. Однако подобные методы характеризуются повышенной вычислительной сложностью, а потому наряду с ними широко используются и другие подходы [8–17], также позволяющие на качественном и количественном уровне анализировать многообразные свойства систем с сильными электронными корреляциями, в частности, совместное влияние атомного (раз)упорядочения и сильных электронных корреляций на свойства сплавов.

С момента появления моделей, подобно модели Хаббарда рассматривающих конкуренцию между локализацией и делокализацией электронов, большое количество работ было посвящено описанию сплавов с сильно взаимодействующими электронами, в том числе концентрационной зависимости их магнитных и транспортных свойств в рамках самой модели Хаббарда [8, 9, 18–22]. Эти и подобные работы определили широкий круг проблем, которые активно исследуются и сегодня. Так, например, продолжается исследование влияния диагонального и недиагонального беспорядков в сильно коррелированных сплавах на их свойства [8, 21–27]. Включение в рассмотрение недиагонального беспорядка, как и учёт перекоков электронов на следующие за ближайшими узлы [8, 28], приводит в модели Хаббарда к изменению закона дисперсии и, соответственно, ширины зоны, тем самым может кардинально изменять свойства сильно коррелированной системы. Диагональный беспорядок также может влиять на свойства системы, изменяя электронную структуру разупорядоченного сплава за счёт дополнительного к хаббардовскому примесного расщепления зон [24–26]. Большинство работ в этом направлении посвящены изучению переходов металл-диэлектрик, а потому акцентируют внимание на появлении разного рода щелей в энергетических спектрах электронов и связанных с попаданием в них уровня Ферми переходах в различные токонепроводящие состояния [23–27]. При этом только сравнительно недавно авторами работ [24, 25] был обоснован и осуществлён выход за рамки половинного заполнения зоны при описа-

нии на базе моделей типа модели Хаббарда переходов металл–диэлектрик в сплавах, а потому, как транспортные, так и магнитные свойства сильно коррелированных сплавов остаются всё ещё недостаточно изученными для всего спектра допустимых значений параметров таких моделей.

Данная работа посвящена исследованию в рамках однозонной модели Хаббарда магнитных свойств неупорядоченных бинарных сплавов замещения с сильными электронными корреляциями в широкой области изменения как величин потенциала кулоновского отталкивания и электронной концентрации, так и концентрации компонентов ОЦК-сплавов.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

При нулевой температуре вклады в электронные свойства сплавов с сильными электронными корреляциями от динамических флуктуаций зарядовой и спиновой плотности исчезают и на первое место выступают вклады от соответствующих статических характеристик и сохраняющихся при любой температуре флуктуаций состава (квантовые флуктуации — предмет отдельного рассмотрения; см., например, [3]). В настоящей работе, являющейся продолжением исследования [29], используется приближение коррелированного случайного поля [10, 30, 31] для однозонной модели Хаббарда, обобщённой на случай упорядочивающихся бинарных сплавов замещения. В основе данного подхода лежит замена в гамильтониане Хаббарда многочастичного члена случайным одночастичным:

$$\sum_{i,s,s' \neq s} U_i n_{is} n_{is'} \cong \sum_{i,s} U_{is} n_{is}, \quad (1)$$

где $U_{is} = U_i \bar{n}_{i-s}$ (черта обозначает квантово-механическое и термодинамическое усреднения), U_i — энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле, n_{is} — оператор числа электронов в состоянии, которое описывается обобщённым вектором Ванье $|is\rangle$, $s, s' = \pm 1/2$ — значения проекции спина электрона на ось Z . Замена (1) позволяет многочастичный гамильтониан электронной подсистемы неупорядоченного бинарного сплава в однозонной модели сильной связи с учётом электрон-электронного взаимодействия [29] представить в виде суммы одночастичных гамильтонианов, $H = \sum_s H_s$, и тем самым открывает путь к решению задачи о движении электрона со спином s по кристаллической решётке с беспорядком замещения с помощью хорошо известных методов теории многократного рассеяния и её кластерных обобщений, например, [11].

Важно отметить, что в отличие от предложенной Хаббардом «сплавной аналогии» [32], в которой величины U_{is} являются случайными и независимыми, распределёнными по бинарному закону, в нашем случае при замене многочастичного слагаемого на соответствующее одночастичное выражение (1), между величинами $\{U_{is}\}$ предполагается статистическая зависимость [10, 30]. Это позволяет учесть флуктуации электронной плотности не только на одном узле, но и корреляции между электронами на соседних узлах, т.е. адекватно описать магнитное упорядочение. Используемый метод пригоден для описания при различных температурах магнетизма как локализованных, так и коллективизированных электронов, а также переходов металл–диэлектрик в сплавах.

Одночастичный гамильтониан модели Хаббарда для сплава можно представить в виде [29]:

$$H_s = \varepsilon_s + H_{0s}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_s = \sum_i \varepsilon_{is} a_{is}^+ a_{is}$ и $H_{0s} = \sum_{i,j \neq i} h_{ij} a_{is}^+ a_{js}$ — соответственно диагональная и недиагональная в узельном представлении части гамильтониана, a_{is}^+ , a_{is} — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии $|is\rangle$, h_{ij} — интегралы перескока, в нашем случае одинаковые и отличные от нуля для ближайших соседей, т.е. $h_{ij} = h_{01}$ ($i \neq j$). Для магнитных бинарных сплавов замещения диагональный по индексам узлов матричный элемент гамильтониана (2) ε_{is} будет принимать случайные значения $\varepsilon_{is}^{\lambda m_\lambda} = W_i^\lambda + U_{is}^{\lambda m_\lambda} n_{is}^{\lambda m_\lambda}$, где матричный элемент потенциальной энергии W_i электрона в поле экранированного ионного остова случайным образом принимает значения W_i^A или W_i^B в зависимости от того, какой атом, А или В, находится в узле i , а матричные элементы оператора U_{is} (1) принимают случайные значения $U_{is}^{\lambda m_\lambda} = U_i^\lambda n_{i-s}^{\lambda m_\lambda}$, где $n_{i-s}^{\lambda m_\lambda}$ — среднее число электронов со спином $-s$, приходящееся на узел i , при условии, что в этом узле находится атом сорта $\lambda = A, B$ с проекцией на ось Oz локализованного магнитного момента

$$m_\lambda = \mu_\lambda^\pm = n_{0\pm s}^{\lambda m_\lambda} - n_{0\mp s}^{\lambda m_\lambda} \quad (3)$$

(эквивалентность узлов кристаллической решётки позволяет ограничиться рассмотрением одного из них, например, с $i = 0$). При получении выражения (3) использовано статическое приближение в методе континуального интегрирования [30].

Заметим, что энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле U_0 , в общем случае, также случайным образом принима-

ет значения U_0^A или U_0^B в зависимости от сорта атома ($\lambda = A, B$) в рассматриваемом (0-м) узле кристаллической решётки. Это позволяет частично учесть зарядовые флуктуации, которыми в работах [10, 30] пренебрегали на основании их существенного подавления сильным кулоновским взаимодействием электронов. В нашем случае зарядовые флуктуации оказываются связанными только с флуктуациями химического состава сплава и имеют тот же тип статистической зависимости, который обуславливает как разупорядочение, так и ближнее и/или дальнее упорядочение атомов разного сорта в сплаве.

Для дальнейшего рассмотрения также важно отметить, что даже использованное в работе при численных расчётах равенство $U_0^A = U_0^B = U$, характерное для изовалентных атомов A и B, полностью не устраняет зависимости эффективного кулоновского взаимодействия электронов на одном узле от сорта атома λ , которая появляется благодаря зависимости матричных элементов $U_{0s}^{\lambda m_\lambda} = U_0 n_{0-s}^{\lambda m_\lambda}$ от величин

$$n_{0s}^{\lambda m_\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E) g_{0s}^{\lambda m_\lambda}(E) dE, \quad (4)$$

где E — энергия электрона, $f(E)$ — функция Ферми. Входящая в (4) условная плотность состояний $g_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ электронов со спином s [29] описывает парциальные вклады от атомов сорта λ с определённой ориентацией магнитного момента в полную плотность состояний. Благодаря минимизирующему свободную энергию самосогласованному расчёту величин $U_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ с использованием (4) и одночастичной функции Грина (ФГ) электронов $G^s = (E + i\delta - H_s)^{-1}$ ($\delta \rightarrow 0$), получаемой в рамках метода кластерного разложения для ФГ неупорядоченного сплава с сильными электронными корреляциями в пренебрежении вкладами процессов рассеяния на кластерах из трёх и более узлов [11, 31], эффективное кулоновское взаимодействие электронов оказывается зависящим как от потенциала примесного рассеяния $W = W_0^B - W_0^A$ и интеграла перескока h_{01} (ширины зоны), так и от значений $P_0^{\lambda m_\lambda}$ вероятностей найти в рассматриваемом узле атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента m_λ , а также устанавливается взаимозависимость $U_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ и величин самих локализованных магнитных моментов на атомах разного сорта и значений $P_{j0}^{\lambda' m_{\lambda'} / \lambda m_\lambda}$ условной вероятности найти в узле $j \neq 0$ атом сорта λ' с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda'}$ при условии, что в узле 0 находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента m_λ . Заметим, что когда речь идёт о вероятностях, то рассматривается только знак « \pm » проекции, т.е. ориентация магнитного момента, а не его модуль. Всё вышесказанное значительно усложняет поведение системы, описываемой в

рамках выбранного в работе подхода, при изменении значений основных параметров сплава: потенциала примесного рассеяния W , концентраций компонентов P_0^λ ($P_0^A + P_0^B = 1$), средней концентрации электронов n в расчёте на один узел, а также энергии кулоновского отталкивания электронов на одном узле U .

Для удобства проведения численных расчётов представим вероятности нахождения атомов сорта λ и локализованных магнитных моментов m_λ в узлах кристаллической решётки в виде:

$$P_0^{\lambda, m_\lambda} \cong P_0^\lambda P_0^{m_\lambda}, \quad P_{j0}^{\lambda', m_{\lambda'}} \cong P_{j0}^{\lambda'/\lambda} P_{j0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda}, \quad (5)$$

где P_0^λ , как уже отмечалось, определяет вероятность заполнения узла 0 атомом сорта λ (в отсутствие дальнего атомного порядка равную концентрации атомов данного сорта), $P_0^{m_\lambda}$ — вероятность того, что в узле 0 проекция локализованного магнитного момента на ось Oz равна m_λ . Условные вероятности $P_{j0}^{\lambda'/\lambda}$ и $P_{j0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda}$ связаны соответственно с параметрами парных корреляций во взаимном расположении атомов (ε_{j0}^{BB}) и парных корреляций в ориентации локализованных магнитных моментов ($\varepsilon_{j0}^{\mu\bar{\lambda}}$) на первой координационной сфере или, иными словами, с параметрами ближнего атомного (ε_a) и магнитного порядка (ε_m), соотношениями:

$$P_{j0}^{\lambda'/\lambda} = P_{j0}^{\lambda'} \pm \varepsilon_{j0}^{BB} / P_0^\lambda, \quad P_{j0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda} = P_{j0}^{m_{\lambda'}} \pm \varepsilon_{j0}^{\mu\bar{\lambda}} / P_0^{m_\lambda}, \quad (6)$$

где знаки «+» перед вторыми слагаемыми соответствуют совпадению соответственно значений λ и λ' или знаков $m_{\lambda'}$ и m_λ , а знаки «-» — их несовпадению.

Средняя концентрация электронов на атом может быть записана через концентрации компонентов сплава P_0^λ в виде:

$$n = Z_A P_0^A + Z_B P_0^B, \quad (7)$$

где Z_λ характеризует число свободных электронов привносимых в сплав атомом сорта $\lambda = A, B$ («валентность»), пересчитанное с учётом вырождения энергетических состояний атома в кристалле на случай однозонной модели, в которой $Z_\lambda \in [0, 2]$. С другой стороны,

$$n = \sum_{\substack{\lambda=A,B \\ m_\lambda=\mu_j^+, \mu_j^- \\ s=\pm 1/2}} P_0^\lambda P_0^{m_\lambda} n_{0s}^{\lambda, m_\lambda} = \sum_{\lambda=A,B} P_0^\lambda n_\lambda, \quad (8)$$

где n_λ является усреднённой по направлениям спина и локализованного магнитного момента концентрацией электронов на рассматриваемом узле кристаллической решётки. Фактически n_λ , как отклонение от среднего значения (n), характеризует флуктуации зарядовой плотности, связанные с возможностью заполнения рас-

смаатриваемого узла атомами разного сорта. Заметим также, что приравнивание выражений (7) и (8) приводит к уравнению для нахождения энергии Ферми (E_F) сплава.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Описанный выше подход ранее уже был применён к рассмотрению влияния потенциала примесного рассеяния W на магнитную фазовую диаграмму бинарного ОЦК-сплава замещения эквиатомного состава [29], т.е. при $P_0^A = P_0^B = 0,5$. В целом, в рамках используемой модели наличие атомов разного сорта может сказываться на свойствах магнитной подсистемы благодаря (а) отличию от нуля величины W (см. [29]), изменениям (б) концентрации компонента А — P_0^A ($P_0^B = 1 - P_0^A$) и (в) средней концентрации электронов n из-за различных Z_A, Z_B , (г) параметров ближнего (ϵ_a) и дальнего (η_a ; см. [31]) атомных порядков, а также из-за (д) различия энергии кулоновского отталкивания электронов $U_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ на атомах сортов А и В. В настоящей работе рассматривается концентрационная зависимость магнитных свойств сплавов с сильными электронными корреляциями, т.е. влияние механизма (б), а также частично (в) и (д) (детальное исследование остальных механизмов планируется в последующих работах). Таким образом, в качестве объекта для численного исследования выбраны бинарные разупорядоченные ($\eta_a, \epsilon_a = 0$) сплавы на основе ОЦК-решётки с межэлектронными корреляциями при $U_0^A = U_0^B = U$. Рассматривается случай отсутствия внешних полей ($P_0^{m_\lambda} = 0,5$) и $T = 0$ К. Энергия измеряется в единицах полуширины энергетической зоны чистого ОЦК-металла $w = 8|h_{01}|$ (начало отсчёта энергии совпадает с $W_0^A = 0$), а локализованные магнитные моменты приводятся в магнетонах Бора μ_B .

На рисунке 1 представлены магнитные фазовые диаграммы (МФД) для чистого металла ($W = 0$; рис. 1, а) и сплавов с $W = -0,1$ при различных значениях концентрации P_0^A (от 0,1 до 0,9; рис. 1, б–е). Малое значение W выбрано с целью избежать описанного в [24] сведения задачи к рассмотрению перенормированной модели Хаббарда для однокомпонентной системы.

Способ построения диаграмм описан в [29], здесь только отметим, что путём минимизации свободной энергии F определялись равновесные значения параметра парных корреляций ϵ_m в ориентации магнитных моментов на соседних узлах и значения самих магнитных моментов μ_λ^\pm , локализованных на атомах обоих сортов ($\lambda = A, B$). Распределение значений указанных величин в плоскости $U-n$ отражено в виде различных областей на МФД согласно следующим правилам: при отличных от нуля значениях локализованных магнитных моментов значению $\epsilon_m = -0,25$ соответствует полное антиферромагнитное упорядочение (AFM), а значению $\epsilon_m = 0,25$ — пол-

ное ферромагнитное упорядочение (FM); при меньшей корреляции в ориентации локализованных магнитных моментов реализуются состояния либо с неполным антиферромагнитным ($-0,25 < \varepsilon_m < 0$; s-AFM), либо с неполным ферромагнитным ($0 < \varepsilon_m < 0,25$; s-FM) упорядочением — эти состояния образуют переходную область, разделённую пунктирной линией, которая соответствует состоянию спинового стекла (SG), для которого $\varepsilon_m \equiv 0$, при $m_\lambda \neq 0$ (очень узкие области с такими значениями параметров, встречающиеся в окрестностях линий SG, на МФД не указаны); парамагнитная фаза (P) характеризуется значениями локализованных магнитных моментов $m_\lambda = 0$.

Каждой точке на магнитных фазовых диаграммах (рис. 1) соответствует своя система с определёнными значениями U , n и μ_λ^\pm , в общем случае, при разных потенциалах примесного рассеяния W и концентрациях P_0^A , рассматриваемая нами как однофазная с теми или иными степенями атомного и магнитного упорядочений, задаваемыми соответствующими параметрами порядка.

Появление потенциала примесного рассеяния $W \neq 0$ и изменение концентрации P_0^A приводят к значительному перераспределению областей магнитных фаз (рис. 1, б–е) в плоскости параметров U – n по сравнению с МФД чистого металла (рис. 1, а), симметричной от-

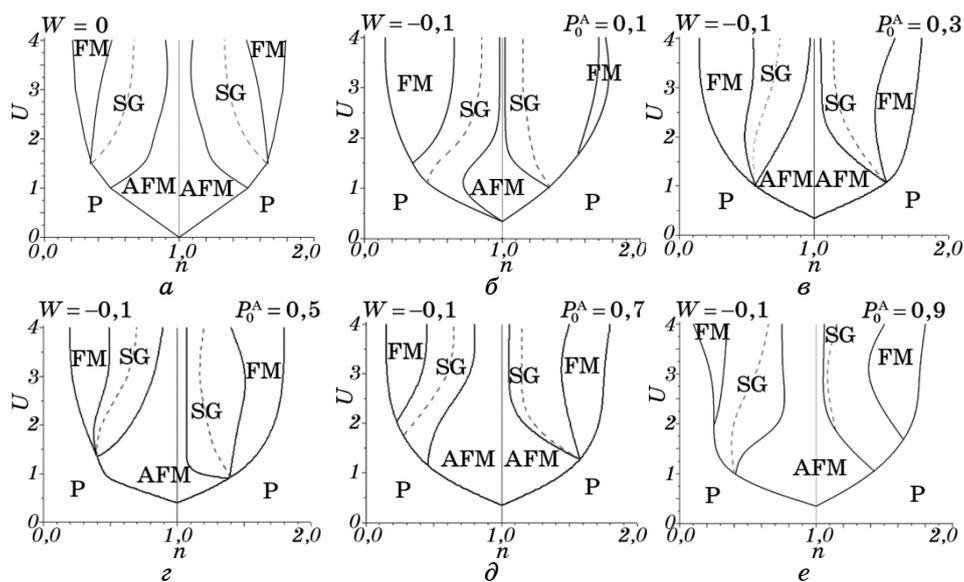


Рис. 1. Магнитные фазовые диаграммы для чистого металла с $W = 0$ (а) и сплавов с $W = -0,1$ при различных значениях концентрации P_0^A (б–е).

Fig. 1. Magnetic phase diagrams for pure metal with $W = 0$ (a) and alloys with $W = -0.1$ for different values of concentration P_0^A (б–e).

носителем линии $n = 1$. Для всех исследованных концентраций компонентов сплава наблюдаются, отмеченные ещё в [29], нарушения электронно-дырочной симметрии и появление порогового характера антиферромагнитного упорядочения при $n = 1$ (половинном заполнении зоны). При этом МФД для концентраций компонентов сплава, расположенных симметрично относительно значения $P_0^A = 0,5$ (рис. 1, z), оказываются существенно отличающимися друг от друга. Как показывает сравнение МФД, наиболее чувствительным к изменениям концентрационного состава сплава оказывается как полное (AFM), так и частичное (s-AFM) антиферромагнитное упорядочение и, соответственно, положение на МФД областей AFM и линий разграничения (SG) неполного ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочений. Хаотичность в расположении ионов разного сорта приводит к подавлению антиферромагнитных корреляций в сплаве, делая более выгодными энергетически либо парамагнитное (при малых U), либо ферромагнитное состояния.

Как уже отмечалось, общей особенностью полученных МФД сплавов (при $P_0^A \neq 0$), по сравнению со случаем $W = 0$, является существование критического значения кулоновского потенциала U_{cr} , выше которого имеет место антиферромагнитное упорядочение вблизи $n = 1$, а ниже — парамагнитное состояние с $m_\lambda = 0$. Другими словами, в рамках используемой нами модели магнитных сплавов наблюдается пороговый характер антиферромагнитного упорядочения. Проявление порогового характера установления магнитоупорядоченного и/или диэлектрического состояния отмечалось во множестве работ (см., например, [2, 8, 20–24, 33, 34]), в которых исследовалось влияние диагонального и недиагонального беспорядка в сплавах, перескоков электронов на следующие за ближайшими узлы в однокомпонентных системах, переноса заряда в разбавленных полупроводниках и пр. Учёт подобных эффектов может приводить, в частности, к нарушению условия нестинга при половинном заполнении ($n = 1$), чего не наблюдается в рамках традиционной модели Хаббарда, точно сводящейся для альтернативных решёток (например, трёхмерных ПК- и ОЦК-решёток) к модели гейзенберговского антиферромагнетика при любых сколь угодно малых значениях $U > 0$ и $n = 1$ [9]. Кроме того, отмечается [24], что ожидается подавление антиферромагнитного упорядочения при малых значениях U за счёт нарушения электронно-дырочной симметрии при хаотическом расположении ионов разного сорта в узлах кристаллической решётки (нарушении трансляционной инвариантности решётки), что и демонстрируют результаты нашего численного эксперимента.

Использованное в настоящей работе предположение о равенстве кулоновских потенциалов отталкивания электронов в узлах, занятых атомами разного сорта, $U_0^A = U_0^B = U$, строго говоря, справедли-

во только для изовалентных атомов А и В, т.е. при $Z_A = Z_B$. Однако, ввиду вышеописанной зависимости матричных элементов $U_{0s}^{\lambda m_\lambda} = U n_{0-s}^{\lambda m_\lambda}$ от сорта атома λ , можно считать зависимость кулоновского взаимодействия электронов от λ , частично учтённой и провести на основании полученных МФД анализ концентрационных зависимостей магнитных свойств не только изовалентных сплавов, но и сплавов с $Z_A \neq Z_B$. При этом следует учесть, что согласно (7) при $Z_A \neq Z_B$ различным значениям P_0^A будут соответствовать различные значения средней концентрации электронов на атом (n). Тогда изменение P_0^A будет сопровождаться не только переходом к новой диаграмме на рис. 1, но и сдвигом по оси n в рамках этой диаграммы (в случае $Z_A = Z_B$ значение n от P_0^A не зависит). Далее будут рассмотрены концентрационные зависимости магнитных характеристик сплавов, соответствующие схематически изображённым на рис. 2 трём наиболее показательным «траекториям перемещения» между (и по) МФД при изменении P_0^A .

Ограничимся рассмотрением магнитных свойств сплавов при фиксированном значении $U = 2$, при котором наблюдаются все характерные изменения магнитных состояний сплава при изменении

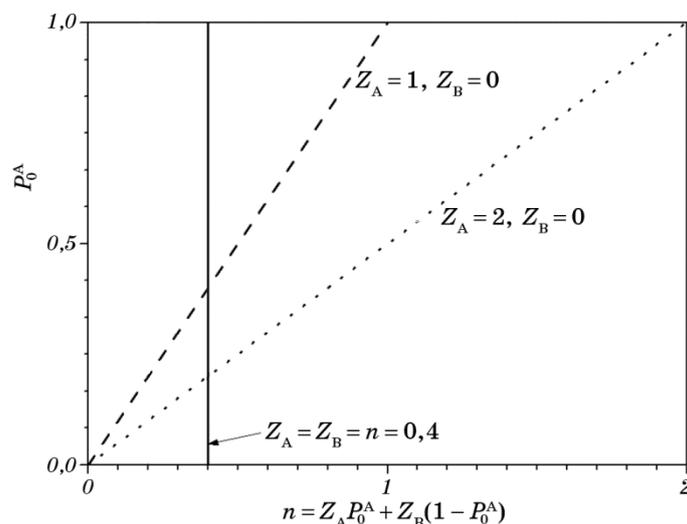


Рис. 2. Схематическое изображение наиболее показательных «траекторий перемещения» между МФД (рис. 1) при изменении концентрации P_0^A , которые соответствуют представленным на рис. 3–6 концентрационным зависимостям магнитных характеристик сплавов.

Fig. 2. Schematic representation of the most revealing ‘trajectories of movement’ between magnetic phase diagrams (MFD) (Fig. 1) due to changes of concentration P_0^A , which correspond to concentration dependences of the alloys’ magnetic characteristics presented in Figs. 3–6.

как n , так и P_0^A . При этом значения параметров парных магнитных корреляций ϵ_m будут указываться на концентрационных зависимостях либо явно, либо в виде введённых выше условных обозначений (P, AFM, FM, SG, s-AFM и s-FM).

Начнём рассмотрение со случая изовалентного сплава $Z_A = Z_B$ с $n = 0,4$ (сплошная линия на рис. 2). На рисунке 3 представлены плотности электронных состояний соответствующего сплава при значениях концентрации $P_0^A = 0,3$ и $P_0^A = 0,7$ ($P_0^B = 0,3$). Видно, что даже при характерных для данного случая одинаковых значениях n , энергетические зависимости плотностей состояний для разных концентраций существенно различаются, как и соответствующие им равновесные значения локализованных магнитных моментов и параметров парных корреляций в их ориентации (см. надписи на рис. 3).

Так, при относительно малой концентрации примеси В, при $P_0^A = 0,7$ (рис. 3, б), в сплаве наблюдаются слабые антиферромагнитные (s-AFM) корреляции ($\epsilon_m \cong -0,09$) в ориентации магнитных моментов. При этом значения магнитных моментов на атомах сорта А оказываются крайне малыми, а на атомах сорта В почти на порядок больше. В условиях преобладания в полностью атомноразупорядоченном сплаве атомов сорта А ($P_0^A = 0,7$) с малым локализованным магнитным моментом атомы сорта В оказываются преимущественно окружёнными слабомагнитными соседями, что су-

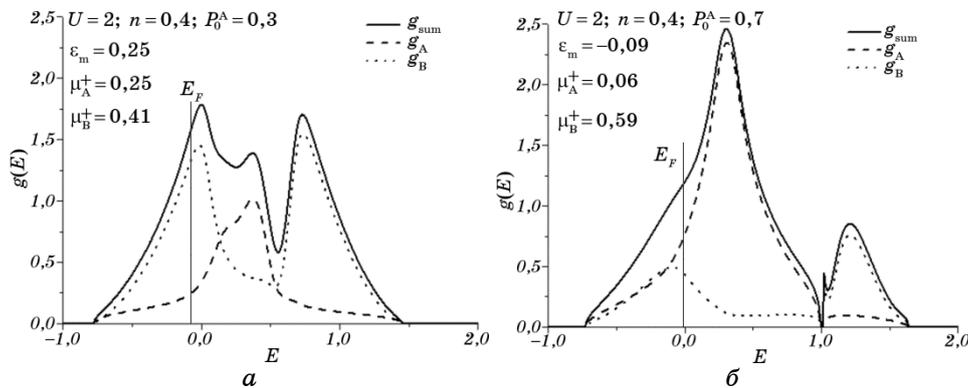


Рис. 3. Плотности электронных состояний ($W = -0,1$) для значений концентрации компонента А сплава, выбранных симметрично относительно состава $P_0^A = P_0^B = 0,5$: (а) — $P_0^A = 0,3$, (б) — $P_0^A = 0,7$.

Fig. 3. Electron densities of states ($W = -0.1$) for the values of concentration of alloy component А chosen symmetrically relative to the composition $P_0^A = P_0^B = 0.5$: (а) — $P_0^A = 0.3$, (б) — $P_0^A = 0.7$.

щественно уменьшает корреляцию в ориентации магнитных моментов на соседних узлах и вызывает в сплаве состояние, близкое к спиновому стеклу (SG) с практически хаотической ориентацией соседних магнитных моментов ($\epsilon_m \cong 0$). Когда в сплаве начинают преобладать атомы сорта В, при $P_0^A = 0,3$ (рис. 3, а), сплав становится полностью упорядоченным ферромагнетиком с различными (но одного порядка) значениями магнитных моментов, локализованных на атомах разных сортов.

Рисунок 3 также поясняет отсутствие симметрии представленных на рис. 4 концентрационных зависимостей характеристик изоэлектронных магнитных сплавов относительно их эквиатомного состава $P_0^A = P_0^B = 0,5$. Заметим, что без учёта сильных электронных корреляций поведение примесных зон и всех физических характеристик, рассчитанных на основе электронной структуры, при изменении концентрации компонентов сплава было бы зеркально-симметричным относительно указанной точки по концентрации.

На рисунке 4 представлены концентрационные зависимости локализованных магнитных моментов на атомах разного сорта (3) и зарядовой плотности (см. (8)), а также параметров парных магнитных корреляций (символьные обозначения возле точек на рис. 4, а). Стоит отметить, что тут и далее (рис. 4–6) линии на графиках обычно не несут иной смысловой нагрузки, кроме указания точек, соответствующих разным отслеживаемым величинам.

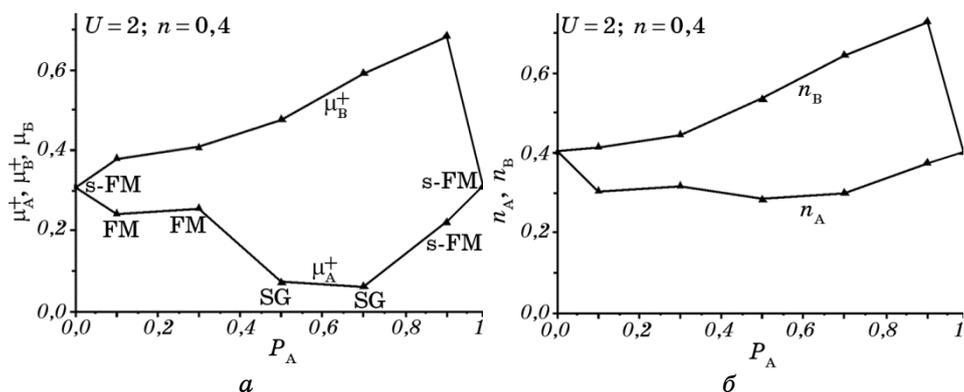


Рис. 4. Концентрационные зависимости локализованных магнитных моментов на атомах разного сорта (а), соответствующих зарядовых плотностей (б) и параметров парных магнитных корреляций (см. символы возле точек на рис. а) для сплавов с $W = -0,1$ и $n = 0,4$ при $Z_A = Z_B$.

Fig. 4. Concentration dependences of localized magnetic moments of the atoms of different types (a), the corresponding charge densities (b), and the parameters of the pair magnetic correlations (see symbols near the points in Fig. a) for alloys with $W = -0.1$ and $n = 0.4$ for $Z_A = Z_B$.

Как видно из рис. 3, при выбранных для расчёта значениях $W = -0,1$ и $W_0^A = 0$ энергетическая подзона электронных состояний на атомах сорта В в немагнитном сплаве была бы расположена на энергетической шкале ниже аналогичной подзоны, соответствующей атомам сорта А. Таким образом, при увеличении n всегда будет иметь место преимущественное заполнение электронами подзоны атомов В. Чем меньше концентрация примеси В и больше значение n , тем большей будет степень заполнения соответствующей подзоны немагнитного сплава. Поэтому при появлении кулоновского отталкивания электронов на одном узле именно для нижней примесной подзоны окажутся наибольшими эффекты, обусловленные сильными электронными корреляциями, в частности, эффект кулоновского расщепления, благодаря которому хаббардовская подзона для двукратно занятых электронами узлов с атомами сорта В будет стремиться к максимальной удалённости от уровня Ферми (рис. 3, б).

Энергетическая выгодность соответствующего перераспределения электронной плотности по атомам разного сорта (см. рис. 4, б) связана с тем, что из-за кулоновского отталкивания энергия пары электронов с разными спинами на одном узле оказывается выше, чем аналогичная энергия на однократно заполненном узле. Учитывая, что кулоновское расщепление хаббардовских подзон пропорционально не только U , но и величине локализованного магнитного момента, для изовалентных сплавов при $n \leq 1$ оказывается энергетически выгодным перераспределение электронной плотности по узлам, увеличивающее значение магнитного момента, локализованного на атомах сорта В, что и наблюдается на рис. 4 (тут и ниже описывается смещение по концентрационным зависимостям на рис. 4 справа налево).

По тем же причинам, а также из-за связи (8) между значениями зарядовой плотности на атомах разного сорта электроны верхней подзоны основного компонента А будут менее подвержены эффектам кулоновской корреляции, что при высоких концентрациях атомов А ($0,5 \leq P_0^A \leq 1$) и небольших значениях n может приводить к наблюдаемому на рис. 3, б и 4 значительному уменьшению величин μ_A^+ и n_A по сравнению с аналогичными величинами для компонента В.

Увеличение концентрации компонента В приводит к увеличению его парциального вклада в полную плотность состояний и тем увеличивает в зоне В долю незаполненных состояний (при фиксированном $n = 0,4$). Это смягчает эффекты сильных электронных корреляций для подзоны атомов сорта В. По этой причине наблюдается (рис. 3, а и рис. 4) некоторое уменьшение значений μ_B^+ , n_B . Соответствующее перераспределение электронной плотности в сплаве приводит также к росту значений μ_A^+ , n_A при уменьшении P_0^A от $\cong 0,5$.

Таким образом, несимметричность концентрационных зависи-

мостей магнитных характеристик изовалентных ($Z_A = Z_B$) сплавов (рис. 3 и 4) относительно точки $P_0^A = P_0^B = 0,5$ оказывается обусловленной изначально заданным знаком величины W различным преимущественным порядком заполнения хаббардовских подзон для элементов А и В.

Заметим, что при $n \geq 1$ характер концентрационных зависимостей, в целом, будет схожим. Однако при их анализе следует учесть, что на фоне однократного заполнения всех узлов электронами появляются двукратно заполненные узлы, и основными свободными носителями заряда и спина теперь будут дырки, образующиеся при перескоке электрона с двукратно занятого узла на однократно занятый. Это ведёт к изменению ролей подзон А и В сплава. В этом случае, с уменьшением n от 2 до 1, будет преимущественно заполняться дырками подзона атомов А, что должно увеличивать корреляционные эффекты для электронов (дырок), локализованных на атомах А, по сравнению с электронами (дырками) в подзоне атомов В, и приводить к соотношению $\mu_A^+ > \mu_B^+$ (что подтверждается правой частью рис. 6, а). При этом, из-за нарушений электронно-дырочной симметрии, как численные значения величин $\mu_{A,B}^+$ и $n_{A,B}$, так и порядок смены магнитных состояний сплава при изменении концентрации компонентов могут существенно отличаться от таковых для случая $n \leq 1$ (ср. правые и левые части рис. 6).

Концентрационная зависимость равновесных значений параметра магнитного порядка ϵ_m , отражающая смену магнитных состояний изовалентного сплава с $n = 0,4$, представлена на рис. 4, а в виде символьных обозначений возле точек одного из графиков. Как отмечалось выше, добавление малой доли примесных атомов В вызывает уменьшение абсолютных значений ϵ_m , что приводит при дальнейшем уменьшении величины P_0^A к переходу системы из слабоферромагнитного состояния (s-FM) при $P_0^A \cong 1$ в состояние спинового стекла (SG). В области значений $P_0^A \leq 0,3$ (см. рис. 3, а и рис. 4, а) в сплаве устанавливается ферромагнитное упорядочение со сравнимыми значениями магнитных моментов на атомах разного сорта и $\mu_A^+ < \mu_B^+$. При концентрации $P_0^A = 0$ система опять становится однокомпонентной и её можно снова описывать, используя МФД на рис. 1, а, отмечая переход в состояние s-FM.

Равенство $n = \text{const}$ при любых изменениях P_0^A перестаёт быть верным в случае $Z_A \neq Z_B$. Так, для сплавов с $Z_A = 1, Z_B = 0$ из (8) получаем зависимость $n = P_0^A$, которой соответствует «траектория» перемещения по МФД (рис. 1) с изменением P_0^A , представленная на рис. 2 штриховой линией. Соответствующие этой «траектории» концентрационные зависимости тех же величин, что и на рис. 4, представлены на рис. 5. Видно, что для сплава ($U = 2$), в котором с увеличением концентрации P_0^A величина n растёт от 0 до 1, имеет место обусловленная изменением n асимметрия концентрационных

зависимостей относительно точки $P_0^A = 0,5$. Для таких сплавов наблюдается зависимость магнитных моментов, локализованных на атомах разного сорта, начинающаяся с нуля в парамагнитной области и выходящая на насыщение при $n \cong 1$ в антиферромагнитной области (проходя на промежуточных этапах через области FM и s-FM). Эта зависимость схожа с аналогичной зависимостью магнитного момента от n для чистого металла [10]. Однако в сплаве наблюдаются различные по знаку отклонения концентрационных зависимостей n_A и n_B (рис. 5, б) от линейной, что находит отражение в существенном различии самих значений магнитных моментов на атомах разного сорта, а также в возможности иной концентрационной зависимости параметров магнитного упорядочения.

Заметим, что значениях $n > 1$ для рассматриваемого типа сплавов с $n = P_0^A \leq 1$, естественно, являются недостижимыми. Однако для сплавов с «зеркальной траекторией», для которых $Z_A = 1, Z_B = 2$ и $n = 2 - P_0^A$, вышеуказанная область $2 \geq n \geq 1$ оказывается доступной. При этом нарушение электронно-дырочной симметрии может приводить к определённым различиям в концентрационных зависимостях магнитных моментов для взаимно «зеркальных» сплавов, а также к изменению последовательности магнитных фазовых состояний при изменении концентрации примеси (ср. с рис. 6).

Случай сплава с $Z_A = 2, Z_B = 0$ (рис. 6) отличается от предыдущих тем, что при $n = 2P_0^A$ он охватывает с изменением P_0^A весь диапазон допустимых значений n (от 0 до 2; пунктирная линия на рис. 2), т.е. области как с $n \leq 1$, так и $n > 1$. При этом части концентрационных зависимостей величин $\mu_{A,B}^+, n_{A,B}$ и ε_m (в виде условных обозначений), расположенные до и после точки $P_0^A = 0,5$, в которой $n = 1$, в общих чертах передают характер вышеописанных зависи-

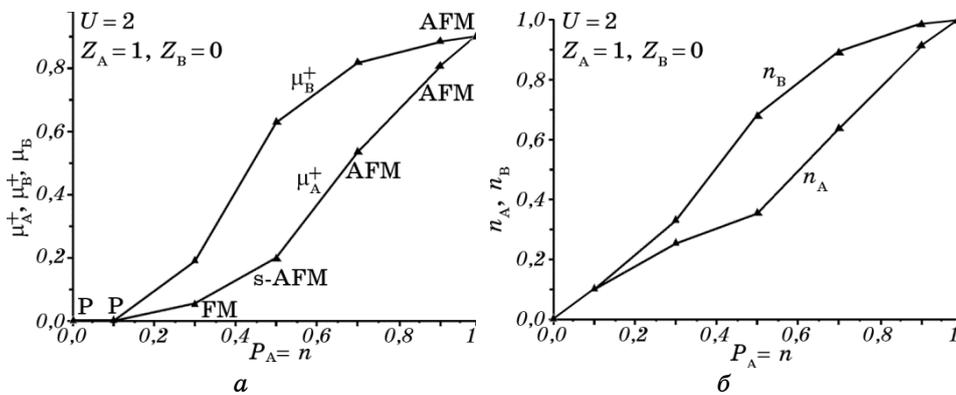


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для сплавов с $Z_A = 1, Z_B = 0$ и $n = P_0^A$.

Fig. 5. Ditto as in Fig. 4, but for alloys with $Z_A = 1, Z_B = 0$ and $n = P_0^A$.

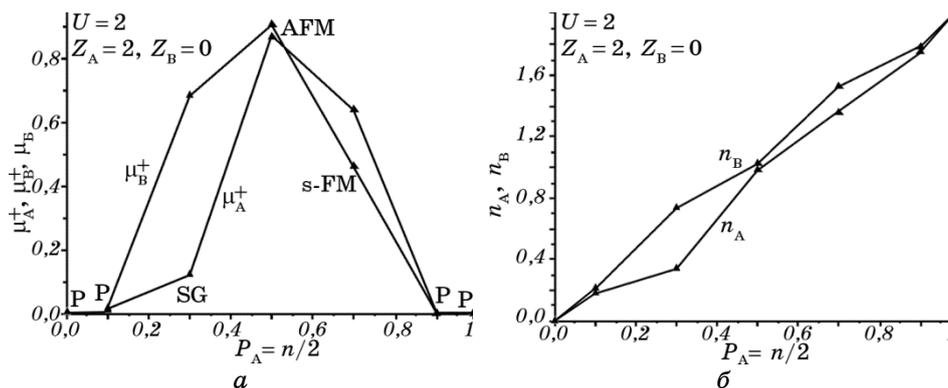


Рис. 6. То же, что на рис. 4, но для сплавов с $Z_A = 2$, $Z_B = 0$ и $n = 2P_0^A$.

Fig. 6. Ditto as in Fig. 4, but for alloys with $Z_A = 2$, $Z_B = 0$ and $n = 2P_0^A$.

мостей, представленных на рис. 5, и их «зеркальных» аналогов, как и, в целом, влияние смены типа свободного носителя заряда на магнитные характеристики сплавов.

Наиболее существенные отличия между левыми и правыми частями концентрационных зависимостей на рис. 6 обусловлены нарушением электронно-дырочной симметрии при смене типа свободного носителя заряда. С уменьшением концентрации электронов n от 2 до 1 концентрация дырок (d) растёт от 0 до 1. При этом, как следует из рис. 6, б, для всех значений P_0^A (и n) сохраняется неравенство $n_B > n_A$ (обусловленное знаком W), что приводит при $n > 1$ к неравенству $d_B < d_A$ и, соответственно, к изменению преобладающей величины магнитного момента с $\mu_A^+ < \mu_B^+$ (при $n < 1$) на $\mu_A^+ > \mu_B^+$ (при $n > 1$). Чем больше отличаются значения n_B и n_A (рис. 6, б), тем больше отличия в значениях μ_A^+ и μ_B^+ (рис. 6, а).

Отсутствие электронно-дырочной симметрии также приводит к нарушению порядка следования магнитных фаз для симметричных точек по концентрации, лежащих выше и ниже точки $P_0^A = 0,5$: слева наблюдается состояние SG, а справа — s-FM. При этом концентрационные зависимости магнитных моментов в рассматриваемых сплавах оказываются менее чувствительными к нарушению электронно-дырочной симметрии и, в отличие от других типов сплавов, являются в значительной степени симметричными относительно значения $P_0^A = 0,5$.

4. ВЫВОДЫ

В рамках однозонной модели Хаббарда, обобщённой на случай бинарных сплавов замещения с сильными электронными корреляци-

ями, показано, что отсутствие трансляционной инвариантности для ОЦК-кристалла с хаотическим расположением атомов разного сорта в узлах кристаллической решётки при всех исследованных значениях концентрации компонентов ($P_0^A \neq 0$) нарушает электронно-дырочную симметрию, что находит отражение в асимметрии магнитных фазовых диаграмм сплавов и в пороговом характере антиферромагнитного упорядочения при половинном заполнении зоны ($n = 1$).

Раскрыт микроскопический механизм формирования особенностей на концентрационных зависимостях электронных свойств изовалентных ($Z_A = Z_B$, $n = \text{const}$) сплавов. Установлено, что различный преимущественный порядок заполнения хаббардовских подзон для элементов А и В, определяемый знаком потенциала примесного рассеяния W , обуславливает несимметричность относительно точки $P_0^A = 0,5$ концентрационных зависимостей магнитных характеристик изовалентных сплавов.

Показано, что несимметричность концентрационных зависимостей для сплавов с $Z_A = 1$, $Z_B = 0$ обусловлена связью $n = P_0^A$. Для таких сплавов наблюдаются концентрационные зависимости магнитных моментов, локализованных на атомах разного сорта, схожие с зависимостью от n аналогичной величины для чистого металла. При этом в сплаве наблюдаются различные по знаку отклонения концентрационных зависимостей n_A и n_B от линейной, что находит отражение не только в существенном различии самих значений магнитных моментов на атомах разного сорта, но и в возможности иной концентрационной зависимости параметров магнитного упорядочения по сравнению с однокомпонентным кристаллом.

Аналогичные закономерности установлены для частей концентрационных зависимостей величин $\mu_{A,B}^+$ и $n_{A,B}$, расположенных до и после точки $P_0^A = 0,5$ ($n = 1$), в сплавах с $Z_A = 2$, $Z_B = 0$. Для этих сплавов на изменение P_0^A и связанное с этим изменение $n = 2P_0^A$, охватывающее весь диапазон допустимых значений (от 0 до 2), накладывается нарушение электронно-дырочной симметрии, которые совместно приводят к появлению асимметричности относительно точки $P_0^A = 0,5$ соответствующих концентрационных зависимостей. При этом для магнитных моментов в данном типе сплавов указанная особенность проявляется в меньшей степени, чем в других типах сплавов, и соответствующая концентрационная зависимость, в отличие от аналогичных зависимостей для $n_{A,B}$ и параметров магнитного порядка, оказывается в значительной степени симметричной.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА—REFERENCES

1. E. Dagotto, *Science*, **309**: 257 (2005).

2. M. Imada, A. Fujimori, and Yo. Tokura, *Rev. Mod. Phys.*, **70**: 1039 (1998).
3. Q. Si and F. Steglich, *Science*, **329**, No. 5996: 1161 (2010).
4. D. N. Basov, R. D. Averitt, D. van der Marel, M. Dressel, and K. Haule, *Rev. Mod. Phys.*, **83**: 471 (2011).
5. S. Gupta and K.G. Suresh, *Journal of Alloys and Compounds*, **618**: 562 (2015).
6. D. Vollhardt, *Annalen der Physik*, **524**, Iss. 1: 1 (2012).
7. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B*, **58**: R7475 (1998).
8. Yu. A. Izyumov and E. Z. Kurmaev, *Physics-Uspekhi*, **51**: 23 (2008).
9. Yu. A. Izyumov, *Physics-Uspekhi*, **38**: 385 (1995).
10. A. N. Andriotis, E. N. Economou, L. Qiming, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev.*, **47**: 9208 (1993).
11. S. P. Repetsky and T. D. Shatnii, *Theoretical and Mathematical Physics*, **131**, Iss. 3: 832 (2002).
12. H. Fukuyama, *Phys. Rev. B*, **5**, No. 8: 2872 (1972).
13. G. F. Abito and J. W. Schweitzer, *Phys. Rev. B*, **11**: 37 (1975).
14. Yu. B. Kudasov, *Physics-Uspekhi*, **46**: 117 (2003).
15. A. V. Ruban, S. Shallcross, S. I. Simak, and H. L. Skriver, *Phys. Rev. B*, **70**: 125115 (2004).
16. I. Turek, J. Kudrnovsky, and V. Drchal, *Phys. Rev. B*, **86**: 014405 (2012).
17. J. Kudrnovsky, V. Drchal, and I. Turek, *Phys. Rev. B*, **91**: 014435 (2015).
18. E. Kolley and W. Kolley, *phys. stat. sol. (b)*, **81**: 735 (1977).
19. V. Christoph and K. Elk, *phys. stat. sol. (b)*, **81**: K125 (1977).
20. S.G. Ovchinnikov, *JETP*, **48**, No. 3: 506 (1978).
21. R. O. Zaitsev, E. V. Kuz'min, and S. G. Ovchinnikov, *Sov. Physics Uspekhi*, **29**: 322 (1986).
22. R. O. Zaitsev, *Fiz. Tverd. Tela*, **27**, No. 2: 305 (1985).
23. K. Byczuk, M. Ulmke, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 196403 (2003).
24. K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*, **69**: 045112 (2004).
25. D. Semmler, K. Byczuk, and W. Hofstetter, *Phys. Rev. B*, **81**: 115111 (2010).
26. P. Lombardo, R. Hayn, and G. I. Japaridze, *Phys. Rev. B*, **74**: 085116 (2006).
27. A. S. Belozеров, A. I. Poteryaev, S. L. Skornyakov, and V. I. Anisimov, *J. of Physics: Condens. Matter*, **27**, No. 46: 465601 (2015).
28. M. A. Timirgazin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *JETP Letters*, **96**: 171 (2012).
29. V. V. Lizunov, E. G. Len, I. M. Melnyk, M. V. Ushakov, T. S. Len, and V. A. Tatarenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**: 575 (2014) (in Russian).
30. E. N. Economou, C. T. White, and R. R. DeMarco, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3946 (1978).
31. S. P. Repetsky, V. B. Molodkin, I. G. Vyshivanaya, E. G. Len, I. N. Melnyk, O. I. Musienko, and B. V. Stashchuk, *Uspehi Fiziki Metallov*, **10**, No. 3: 283 (2009) (in Russian).
32. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **281**, No. 1386: 401 (1964).
33. M. I. Katsnelson and V. Yu. Irkhin, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **17**: 4291 (1984).
34. R. Peters and Th. Pruschke, *Physica B*, **404**: 3249 (2009).