

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

Энергетический спектр и электропроводность систем с сильными электронными корреляциями

С. П. Репецкий^{*,**}, В. Б. Молодкин^{*,**}, И. Г. Вышиваная^{**},
Е. Г. Лень^{*}, И. Н. Мельник^{*}, О. И. Мусиенко^{**}, Б. В. Стащук^{***}

^{*}*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

^{**}*Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко,
физический факультет,
просп. Акад. Глушкова, 2, корп. 1,
03022 Киев-22, Украина*

^{***}*Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко,
факультет кибернетики,
просп. Акад. Глушкова, 2, корп. 6,
03022 Киев-22, Украина*

Изложена теория электропроводности кристаллов с сильными электронными корреляциями. Рассматриваются различные подходы к описанию электропроводности неупорядоченных систем. Изложен метод вычисления двухчастичной функции Грина (электропроводности) неупорядоченного кристалла. Учитываются процессы рассеяния электронов на потенциалах ионных остовов, флуктуациях спиновой и электронной плотностей и колебаниях кристаллической решетки. Расчеты основаны на диаграммной технике для температурных функций Грина. Получено кластерное разложение для двухчастичной функции Грина. За нулевое одноузельное приближение в кластерном разложении выбирается приближение когерентного потенциала. Исследованы энергетический спектр электронов, атомное и магнитное упорядочение, оптическая проводимость, температурная и концентрационная зависимости электросопротивления, а также спин-зависимый транспорт сплава Fe–Co.

Викладено теорію електропровідності кристалів з сильними електронними кореляціями. Розглядаються різноманітні підходи до опису електропровідності неупорядкованих систем. Викладено методу обчислення двочастинкової Грінової функції (електропровідності) неупорядкованого кристалу. Враховуються процеси розсіяння електронів на потенціалах йонних остовів, флуктуаціях спінової й електронної густин та коливаннях кристалічної ґратниці. Розрахунки ґрунтуються на діаграмній тех-

ніці для температурних Грінових функцій. Одержано кластерне розвинення для двочастинкової Грінової функції. За нульове одновузлове наближення у кластернім розвиненні обирається наближення когерентного потенціалу. Досліджено енергетичний спектр електронів, атомове й магнетне впорядкування, оптичну провідність, температурну і концентраційну залежності електроопору, а також спін-залежний транспорт стопу Fe–Co.

Theory of electroconductivity in crystals with strong electron correlations is developed. Different approaches for description of disordered-systems' electroconductivity are considered. The method of two-particle Green's function (electroconductivity) calculation for disordered crystals is developed. The processes of electron scattering on spin and density fluctuations, ion-core potentials and vibrations of a crystal lattice are taken into account. Calculations are based on a diagram technique for temperature Green's functions. The cluster expansion for two-particle Green function is obtained. The coherent-potential approximation is chosen as a zeroth-order one-site approximation in above-mentioned cluster expansion. The energy spectrum of electrons, atomic and magnetic orderings, optical conductivity, temperature and concentration dependences of electroresistance and spin-dependent transport of Fe–Co alloy are investigated.

Ключевые слова: энергетический спектр, электронная плотность, локализованные магнитные моменты, атомное и магнитное упорядочение, электропроводность, спин-зависимый транспорт, функции Грина, уровень Ферми.

(Получено 2 марта 2009 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Успехи в исследовании свойств неупорядоченных систем (сплавов, неупорядоченных полупроводников, магнитных материалов) связаны с развитием их электронной теории.

Традиционные представления о свойствах неупорядоченных систем, основанные на борновском приближении, заведомо неприменимы в случае большого потенциала примесного рассеяния, который имеет место, например, при описании сплавов переходных металлов. Значительные успехи в описании таких систем обусловлены применением методов многократного рассеяния, в том числе приближения когерентного потенциала (ПКП) [1], которое является лучшим одноузельным приближением при описании свойств сплавов. Однако для того, чтобы учесть межатомные корреляции, от которых существенно зависят свойства неупорядоченных систем, необходимо выйти за рамки одноузельного приближения, т.е. учесть рассеяние на кластерах. Этой проблеме в литературе посвящено множество работ. Кластерные обобщения ПКП, основанные

на рассмотрении единичного кластера в эффективной среде, не гарантируют аналитичности и трансляционной инвариантности усредненной по различным расположениям атомов функции Грина [1]. Среди кластерных обобщений ПКП следует выделить метод присоединенного пространства [2–4] и приближение «блуждающего кластера» [5], в которых решена задача построения самосогласованной аппроксимации, учитывающей рассеяние на кластерах при сохранении аналитичности и трансляционной инвариантности усредненной по конфигурациям функции Грина системы. Эквивалентность приближения «блуждающего кластера» [5] и метода присоединенного пространства [2–4] доказана в работе [6]. Обобщение метода присоединенного пространства на случай систем с ближним порядком выполнено в работах [7–10]. Однако в упомянутых подходах не вводился какой-либо малый параметр, поэтому трудно оценить точность сделанных приближений.

В работах [11–16] развит метод вычисления усредненной по конфигурациям функции Грина и свободной энергии электронов сплава, основанный на разложении T -матрицы по одноцентровым операторам рассеяния и последующем расщеплении среднего от произведения одноцентровых операторов на произведение средних от произведения пар операторов. В качестве нулевого приближения выбрано приближение ПКП. Введен малый параметр разложения [17]. Однако вопрос о точности сделанных приближений остался неисследованным. Были развиты также приложения этого метода к расчету плотности электронных состояний и энергии упорядочения частично упорядоченных сплавов [11, 12], параметров ближнего порядка и эффективных межатомных взаимодействий [14, 15], определению стабильности упорядоченных структур [16].

В работах [18, 19] развит метод учета статистических корреляций, основанный на кластерном разложении для одно- и двухчастичной функций Грина, определяющих соответственно энергетический спектр электронов и электропроводность сплавов. В качестве нулевого приближения в этом методе выбирается ПКП. Затем находят поправки к ПКП путем суммирования вкладов процессов рассеяния на кластерах из двух, трех и т.д. атомов. Показано, что вклады соответствующих процессов рассеяния убывают с увеличением числа частиц в кластере. Это убывание определяется малым параметром, который аналогичен параметру, введенному ранее в работе [17]. Исследование этого параметра [12, 18–20] показывает, что он может быть малым в широкой области изменений характеристик сплава (включая концентрацию компонентов), за исключением узкого интервала значений энергии на краю спектра.

Однако в указанных выше работах при описании электронных состояний не учитывались колебания кристаллической решетки, которые могут давать значительные вклады в энергию упорядоче-

ния, параметры межатомных корреляций и существенно влиять на свойства системы. Следует указать, что в работах [21, 22] сделана попытка учета вклада электрон-фононного взаимодействия в термодинамический потенциал и электронную теплоемкость сплава. В работах [23, 24] исследовано влияние электрон-фононного взаимодействия на электропроводность неупорядоченных сплавов. Однако в работах [21–24] не были учтены межатомные корреляции, а электрон-фононное взаимодействие считалось слабым. Кроме того, во всех указанных выше работах не учитывались электронные корреляции, которые могут существенно влиять на свойства систем на основе переходных и редкоземельных элементов.

В работе [25] получено кластерное разложение для функций Грина и термодинамического потенциала системы электронов и фононов неупорядоченного сплава. Электронные состояния системы описаны в многозонной модели сильной связи. За нулевое одноузельное приближение в данном разложении выбрано ПКП. Показано, что вклады процессов рассеяния элементарных возбуждений на кластерах убывают с увеличением числа атомов в кластере по некоторому малому параметру. Полученные результаты указывают на возможные пути обобщения известной в теории магнетизма однозонной модели Хаббарда для описания влияния сильных электронных корреляций на электронную структуру и свойства неупорядоченных систем с узкими энергетическими зонами.

Применимость развитого в работе [25] метода для описания структурных и магнитных фазовых превращений в сплавах продемонстрирована в работе [26].

Однако теория электропроводности неупорядоченных систем с сильными электронными корреляциями находится на стадии развития.

Развитие подходов к описанию электропроводности систем с сильными электронными корреляциями стало особенно актуальным после открытия явления спин-зависимого транспорта, которое имеет широкие перспективы применения в микроэлектронике [27–29].

В настоящей работе с использованием предложенного ранее в работе [25] метода развита теория электропроводности кристаллов с сильными электронными корреляциями. Учитываются процессы рассеяния электронов на потенциалах ионных остовов, флуктуациях спиновой и электронной плотности, колебаниях кристаллической решетки и статических смещениях атомов. Получено выражение для двухчастичной функции Грина (электропроводности) неупорядоченного кристалла. Электронные состояния в данном методе описываются в рамках многозонной модели сильной связи. Расчеты базируются на диаграммной технике для температурных функций Грина. При этом используется связь между изображения-

ми Фурье для запаздывающей и температурной функций Грина. Предложен метод кластерного разложения для двухчастичной функции Грина, аналогичный развитому в работе [25] методу кластерного разложения для одночастичных функций Грина и термодинамического потенциала неупорядоченного кристалла. За нулевое одноузельное приближение в этом методе кластерного разложения выбирается приближение когерентного потенциала. Показано, что вклады процессов рассеяния элементарных возбуждений на кластерах уменьшаются с увеличением числа узлов в кластере за малыми параметрами, введенными ранее в работе [25]. Демонстрируется применение развитого здесь подхода к описанию спин-зависимого транспорта в сплавах переходных металлов. Определены условия возникновения эффекта спин-зависимого транспорта в сплавах при наличии внешнего магнитного поля.

2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ

Гамильтониан системы электронов и фононов неупорядоченного кристалла (металлического сплава, неупорядоченного полупроводника) в представлении Ваннье имеет вид [25]

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

где гамильтониан нулевого приближения

$$H_0 = \Phi_0 + H_{ph0} + H_{e0} \quad (2)$$

состоит из гамильтониана подсистемы невзаимодействующих электронов

$$H_{e0} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (3)$$

гамильтониана подсистемы невзаимодействующих фононов

$$H_{ph0} = \sum_{ni\alpha} \frac{P_\alpha^2 \binom{n}{i}}{2M_A} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \alpha_1 \\ n_2 i_2 \alpha_2}} \Phi_{\alpha_1 \alpha_2}^{(0)} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} u_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

и энергии электростатического взаимодействия ионов Φ_0 в положении равновесия.

Гамильтониан возмущения в формуле (1)

$$H_{\text{int}} = H_{ei} + H_{eph} + H_{ee} + H_{phi} + H_{phph} \quad (5)$$

состоит из гамильтониана электрон-ионного (электрон-примесного) взаимодействия

$$H_{ei} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (6)$$

гамильтониана электрон-фононного взаимодействия

$$H_{eph} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (7)$$

гамильтониана парного электрон-электронного взаимодействия

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2, \\ n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}} v^{(2)}_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2, n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}^+ a_{n_3 i_3 \gamma_3} a_{n_4 i_4 \gamma_4}, \quad (8)$$

гамильтониана фонон-ионного (фонон-примесного) взаимодействия

$$H_{phi} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \alpha_1 \\ n_2 i_2 \alpha_2}} \Delta M_{\alpha_1 \alpha_2}^{-1} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} P_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} P_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \alpha_1 \\ n_2 i_2 \alpha_2}} \Delta \Phi_{\alpha_1 \alpha_2} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} u_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где

$$\Delta M_{\alpha_1 \alpha_2}^{-1} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{M_{n_1 i_1}} - \frac{1}{M_A} \right) \delta_{n_1 n_2} \delta_{i_1 i_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}, \\ \Delta \Phi_{\alpha_1 \alpha_2} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha_1 \alpha_2} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} - \Phi_{\alpha_1 \alpha_2}^{(0)} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix},$$

и гамильтониана фонон-фононного взаимодействия

$$H_{phph} = \frac{1}{3!} \sum_{\substack{n_1 i_1 \alpha_1 \\ n_2 i_2 \alpha_2 \\ n_3 i_3 \alpha_3}} \Phi_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ i_1 & i_2 & i_3 \end{pmatrix} u_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} u_{\alpha_3} \begin{pmatrix} n_3 \\ i_3 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь, $a_{ni\gamma}^+$, $a_{ni\gamma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии, которое описывается функцией Ванье $\varphi_{ni\gamma}(\xi) = \langle \xi | ni\gamma \rangle$, $\xi = (\mathbf{r}, s)$; индекс состояния γ определяется номером энергетической

зоны и проекцией спина s на ось z , n — номер элементарной ячейки кристалла, i — номер узла подрешетки в элементарной ячейке; $h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)}$ — матричные элементы одноэлектронного гамильтониана чистого кристалла, который состоит из атомов сорта A ; $\mathbf{u} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}$ — оператор смещения атома в узле (ni) ; $P_\alpha \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}$ — оператор α -проекции импульса атома на декартовые оси координат ($\alpha = x, y, z$); $\Phi_{\alpha_1 \alpha_2} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix}$, $\Phi_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ i_1 & i_2 & i_3 \end{pmatrix}$ — силовые постоянные.

Оператор потенциальной энергии электрона в поле ионных остров кристалла $V(\mathbf{r})$ можно представить в виде

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{ni} v^{ni}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{ni}), \quad \mathbf{r}'_{ni} = \mathbf{r}_{ni} + \mathbf{u}^s \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix} + \mathbf{u} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix},$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор электрона, $\mathbf{r}_{ni} = \mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i$ — радиус-вектор равновесного положения атома в узле (ni) кристаллической решетки, $\mathbf{u}^s \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}$ — вектор статического смещения атома в узле (ni) из положения равновесия. Случайная добавка к матричному элементу одноэлектронного гамильтониана чистого кристалла, связанная с наличием примеси, есть

$$w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni} = \sum_{ni} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni}, \quad (11)$$

где

$$w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni} = \sum_{\lambda} c_{ni}^{\lambda} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni},$$

$$w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} = v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} + \Delta v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} - v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{Ani},$$

$$v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} = \int \Phi_{n_1 i_1 \gamma_1}^*(\xi) v^{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}) \Phi_{n_2 i_2 \gamma_2}(\xi) d\xi.$$

Здесь c_{ni}^{λ} — случайные числа, которые принимают значение 1 или 0 в зависимости от того, находится атом сорта λ в узле (ni) или нет; $v^{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni})$ — потенциальная энергия электрона в поле иона сорта λ .

В формуле (7) величины $v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}$ выражаются через операторы координат кристаллической решетки следующим образом:

$$v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} = \sum_{n i \alpha} v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}{}^{n i \alpha} u_{\alpha} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix};$$

где $v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}{}^{n i \alpha} = \sum_{\lambda} c_{ni}^{\lambda} v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}{}^{\lambda n i \alpha}$, $v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}{}^{\lambda n i \alpha}$ определено формулой (11),

где вместо $v^{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni})$ стоит $-e_{ni\alpha} \frac{d}{d|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|} v^{\lambda}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|)$, а $e_{ni} = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|}$.

Величины $\Delta v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda n i}$ в (11) описывают рассеяние электронов на статических смещениях атомов и определяются выражением

$$\Delta v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda n i} = \sum_{\alpha} v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}{}^{\lambda n i \alpha} u_{\alpha}^s \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}.$$

Выражения (1)–(11) для гамильтониана системы электронов и фононов неупорядоченного кристалла получены в работе [25]. Однако в отмеченной работе не учитывались статические смещения атомов из положения равновесия.

3. ФУНКЦИИ ГРИНА СИСТЕМЫ ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ НЕУПОРЯДОЧЕННОГО КРИСТАЛЛА

Для расчета энергетического спектра и электропроводности неупорядоченного кристалла введем двухчасовые функции Грина.

Обозначим двухчасовые запаздывающую $G_r^{AB}(t, t')$ и опережающую $G_a^{AB}(t, t')$ функции Грина системы [30, 31]:

$$G_r^{AB}(t, t') \equiv \langle\langle \tilde{A}(t) | \tilde{B}(t') \rangle\rangle_r = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle,$$

$$G_a^{AB}(t, t') \equiv \langle\langle \tilde{A}(t) | \tilde{B}(t') \rangle\rangle_a = \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle. \quad (12)$$

Оператор в изображении Гейзенберга:

$$\tilde{A}(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar},$$

где $H = H - \mu_e N_e$, μ , N — соответственно химический потенциал и оператор числа электронов, $\theta(t)$ — функция Хевисайда. Скобки $\langle \dots \rangle$ в (12) обозначают операцию усреднения

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A), \quad \rho = e^{(\Omega - H)/\Theta},$$

где Ω — термодинамический потенциал системы, $\Theta = k_B T$, T — температура.

Усреднение в формуле (12) проводится по состояниям системы электронов и фононов в реальном кристалле при заданном расположении атомов.

Расчет двухчасовых запаздывающих и опережающих функций Грина (12) базируется на расчете температурных функций Грина. При этом используется известное соотношение между спектральными представлениями для запаздывающей, опережающей и температурной функции Грина [30].

Определим температурную функцию Грина соотношением

$$G^{AB}(\tau, \tau') = - \langle T_{\tau} \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(\tau') \rangle, \quad (13)$$

где оператор $\tilde{A}(\tau)$ получается из оператора $\tilde{A}(t)$ путем замены $t = -i\hbar\tau$:

$$\tilde{A}(\tau) = e^{H\tau} A e^{-H\tau},$$

$$T_{\tau} \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(\tau') = \theta(\tau - \tau') \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(\tau') + \eta \theta(\tau' - \tau) \tilde{B}(\tau') \tilde{A}(\tau),$$

$\eta = 1$ для бозе-операторов A, B и $\eta = -1$ для ферми-операторов.

Введем оператор

$$\sigma(\tau) = e^{H_0\tau} e^{-H\tau}, \quad (14)$$

где $H = H_0 + H_{\text{int}}$, $H_0 = H_0 - \mu_e N_e$. Оператор $\sigma(\tau)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \sigma(\tau)}{\partial \tau} = -H_{\text{int}}(\tau) \sigma(\tau),$$

где $H_{\text{int}}(\tau) = e^{H_0\tau} H_{\text{int}} e^{-H_0\tau}$.

Решение последнего уравнения при условии $\sigma(0) = 1$, которое следует из определения (14), имеет вид

$$\sigma(\tau) = T_{\tau} \exp \left[- \int_0^{\tau} H_{\text{int}}(\tau') d\tau' \right]. \quad (15)$$

Учитывая выражение (14), для оператора A в изображении Гейзенберга можно написать

$$\tilde{A}(\tau) = \sigma^{-1}(\tau) A(\tau) \sigma(\tau). \quad (16)$$

Выражение (13) для температурной функции Грина с учетом (14), (16) можно привести к виду

$$G^{AB}(\tau, \tau') = - \langle T_{\tau} A(\tau) B(\tau') \sigma(1/\Theta) \rangle_0 / \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0, \quad (17)$$

где $\langle A \rangle_0 = \text{Sp}(\rho_0 A)$, $\rho_0 = e^{(\Omega_0 - H_0)/\Theta}$.

Раскладывая экспоненту в выражении (15) для $\sigma(\tau)$ в ряд по степеням $H_{\text{int}}(\tau)$, подставляя результат в (17) и используя теорему Вика [30, 31], для расчета температурных функций Грина неупорядоченного кристалла можно построить диаграммную технику, аналогичную диаграммной технике для однородной системы [30].

Используя известные соотношения между спектральными представлениями температурной и временной функций Грина [30], путем аналитического продолжения на действительную ось получим систему уравнений для запаздывающих функций Грина (индекс r здесь и в дальнейшем будем опускать) [25]:

$$\begin{aligned} G^{aa^+}(\varepsilon) &= G_0^{aa^+}(\varepsilon) + G_0^{aa^+}(\varepsilon)(w + \Sigma_{eph}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon))G^{aa^+}(\varepsilon), \\ G^{uu}(\varepsilon) &= G_0^{uu}(\varepsilon) + G_0^{uu}(\varepsilon)(\Delta\Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon))G^{uu}(\varepsilon) + G_0^{uP}(\varepsilon)\Delta M^{-1}G^{Pu}(\varepsilon), \\ G^{PP}(\varepsilon) &= G_0^{PP}(\varepsilon) + G_0^{PP}(\varepsilon)\Delta M^{-1}G^{PP}(\varepsilon) + G_0^{Pu}(\varepsilon)(\Delta\Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon))G^{uP}(\varepsilon), \\ G^{uP}(\varepsilon) &= G_0^{uP}(\varepsilon) + G_0^{uP}(\varepsilon)\Delta M^{-1}G^{PP}(\varepsilon) + G_0^{uu}(\varepsilon)(\Delta\Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon))G^{uP}(\varepsilon), \\ G^{Pu}(\varepsilon) &= G_0^{Pu}(\varepsilon) + G_0^{Pu}(\varepsilon)(\Delta\Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon))G^{uu}(\varepsilon) + \\ &\quad + G_0^{PP}(\varepsilon)\Delta M^{-1}G^{Pu}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (18)$$

где $\varepsilon = \hbar\omega$. Здесь $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$, $G^{PP}(\varepsilon)$, $G^{uP}(\varepsilon)$, $G^{Pu}(\varepsilon)$ — одночастичная запаздывающая функция Грина подсистемы электронов, функции Грина «смещение–смещение», «импульс–импульс», «смещение–импульс», «импульс–смещение» подсистемы фононов; $\Sigma_{eph}(\varepsilon)$, $\Sigma_{phe}(\varepsilon)$, $\Sigma_{ee}(\varepsilon)$, $\Sigma_{phph}(\varepsilon)$ — массовые операторы, которые описывают электрон-фононное, фонон-электронное, электрон-электронное и фонон-фононное взаимодействия; ΔM^{-1} , $\Delta\Phi$ — разницы матриц обратной массы и силовых постоянных неупорядоченного кристалла и идеального кристалла, который описывается гамильтонианом нулевого приближения H_0 .

Из уравнений движения для функций Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$, $G_0^{uu}(\varepsilon)$, $G_0^{PP}(\varepsilon)$, $G_0^{uP}(\varepsilon)$, $G_0^{Pu}(\varepsilon)$ можно получить

$$\begin{aligned} G_0^{aa^+}(\varepsilon) &= [\varepsilon - H_0^{(1)}]^{-1}, \\ H_0^{(1)} &= \|h_{ni\gamma, n'i'\gamma}^0\|, \\ G_{0ni\alpha, n'i'\alpha'}^{uu}(\varepsilon) &= \frac{1}{NM_A} \sum_{j, \mathbf{k}} \frac{e_\alpha \begin{pmatrix} i & | & \mathbf{k} \\ j & | & \mathbf{k} \end{pmatrix} e_{\alpha'}^* \begin{pmatrix} i' & | & \mathbf{k} \\ j & | & \mathbf{k} \end{pmatrix}}{\varepsilon^2 / \hbar^2 - \omega_j^2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \bar{\rho}_{i'})}, \end{aligned}$$

$$G_{0n\alpha, n'i'\alpha'}^{PP}(\varepsilon) = \frac{M_A}{N} \sum_{j, \mathbf{k}} \frac{\omega_j^2(\mathbf{k}) e_\alpha \left(\begin{matrix} i \\ j \end{matrix} \middle| \mathbf{k} \right) e_{\alpha'}^* \left(\begin{matrix} i' \\ j \end{matrix} \middle| \mathbf{k} \right)}{\varepsilon^2 / \hbar^2 - \omega_j^2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \vec{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \vec{\rho}_{i'})},$$

$$\Phi^{(0)} G_0^{uP}(\varepsilon) = i \frac{\varepsilon}{\hbar} G_0^{PP}(\varepsilon), \quad M_A^{-1} G_0^{Pu}(\varepsilon) = -i \frac{\varepsilon}{\hbar} G_0^{uu}(\varepsilon), \quad (19)$$

где N — число элементарных ячеек кристалла; $j = 1, 2, \dots, 3\nu$, ν — число подрешеток; вектор \mathbf{k} изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна. В выражениях (19) $e_\alpha \left(\begin{matrix} i \\ j \end{matrix} \middle| \mathbf{k} \right)$, $\omega_j^2(\mathbf{k})$ определяют собственные векторы и собственные значения динамической матрицы кристаллической решетки, которые удовлетворяют уравнению

$$\sum_{i'\alpha'} D_{\alpha\alpha'} \left(\begin{matrix} \mathbf{k} \\ i \ i' \end{matrix} \right) e_{\alpha'} \left(\begin{matrix} i' \\ j \end{matrix} \middle| \mathbf{k} \right) = \omega_j^2(\mathbf{k}) e_\alpha \left(\begin{matrix} i \\ j \end{matrix} \middle| \mathbf{k} \right), \quad (20)$$

где $D_{\alpha\alpha'} \left(\begin{matrix} \mathbf{k} \\ i \ i' \end{matrix} \right) = \frac{1}{M_A} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\alpha'}^{(0)} \left(\begin{matrix} \mathbf{0} & n' \\ i & i' \end{matrix} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{n'}}$.

Для бесконечно большого кристалла из (19) следует

$$G_0^{PP}(\varepsilon) = M_A^2 \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \right) G_0^{uu}(\varepsilon).$$

В этом случае решение системы (18) имеет вид:

$$G^{aa^+}(\varepsilon) = \left[[G_0^{aa^+}(\varepsilon)]^{-1} - (w + \Sigma_{eph}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon)) \right]^{-1},$$

$$G^{uu}(\varepsilon) = \left[[G_0^{uu}(\varepsilon)]^{-1} - \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Delta\Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon) \right) \right]^{-1},$$

$$\Delta M^{-1} G^{PP}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M G^{uu}(\varepsilon), \quad (21)$$

где $\Delta M = \|(M_A - M_{ni})\delta_{nn'}\delta_{ii'}\delta_{\alpha\alpha'}\|$.

Явные выражения для массовых операторов функций Грина, которые описывают многочастичные взаимодействия в системе, можно найти, воспользовавшись диаграммной техникой [30]. В результате для электрон-фононного взаимодействия получим [25]

$$\Sigma_{eph\ n i\gamma, n' i'\gamma'}(\varepsilon) = \sum_{\substack{\lambda_1 n_1 i_1 \\ \lambda_2 n_2 i_2}} c_{n_1 i_1}^{\lambda_1} c_{n_2 i_2}^{\lambda_2} \Sigma_{eph\ n i\gamma, n' i'\gamma'}^{\lambda_1 n_1 i_1, \lambda_2 n_2 i_2}(\varepsilon), \quad (22)$$

где

$$\Sigma_{e\ ph\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{\lambda_1 n_1 i_1, \lambda_2 n_2 i_2}(\varepsilon) = -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \coth\left(\frac{\varepsilon'}{2\Theta}\right) v_{ni\gamma, n_3 i_3 \gamma_3}^{\lambda_1 n_1 i_1 \alpha_1} \left[G_{n_1 i_1 \alpha_1, n_2 i_2 \alpha_2}^{uu}(\varepsilon') - G_{n_2 i_2 \alpha_2, n_1 i_1 \alpha_1}^{uu*}(\varepsilon') \right] \times \\ \times G_{n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+}(\varepsilon - \varepsilon') v_{n_4 i_4 \gamma_4, n' i' \gamma'}^{\lambda_2 n_2 i_2 \alpha_2}.$$

По индексам, которые повторяются, проводится суммирование.

Фонон-электронное взаимодействие описывается выражением [25]

$$\Sigma_{ph\ e\ ni\alpha, n'i'\alpha'}(\varepsilon) = \sum_{\lambda\lambda'} c_{ni}^{\lambda} c_{n'i'}^{\lambda'} \Sigma_{ph\ e\ ni\alpha, n'i'\alpha'}^{\lambda\lambda'}(\varepsilon), \quad (23)$$

где

$$\Sigma_{ph\ e\ ni\alpha, n'i'\alpha'}^{\lambda\lambda'}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\varepsilon') v_{n_2 i_2 \gamma_2, n_1 i_1 \gamma_1}^{\lambda n i \alpha} \times \\ \times \left\{ \left[G_{n_1 i_1 \gamma_1, n_3 i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon + \varepsilon') - G_{n_3 i_3 \gamma_3, n_1 i_1 \gamma_1}^{aa^+*}(\varepsilon + \varepsilon') \right] G_{n_2 i_2 \gamma_2, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+*}(\varepsilon') + \right. \\ \left. + G_{n_1 i_1 \gamma_1, n_3 i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon + \varepsilon') \left[G_{n_4 i_4 \gamma_4, n_2 i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\varepsilon') - G_{n_2 i_2 \gamma_2, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+*}(\varepsilon') \right] \right\} v_{n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}^{\lambda' n' i' \alpha'}.$$

Для электрон-электронного взаимодействия имеем [25]

$$\Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}(\varepsilon) = \Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(1)} + \Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(2)}, \quad (24)$$

где

$$\Sigma_{ee\ n, n'}^{(1)} = -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\varepsilon') \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} \left[G_{n_1, n_2}^{aa^+}(\varepsilon') - G_{n_2, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon') \right], \\ \Sigma_{ee\ n, n'}^{(2)} = -\left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_2 \tilde{v}_{n_2, n_1}^{(2)n, n_3} \times \\ \times \left\{ f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \left(G_{n_5, n_2}^{aa^+*}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_4, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon_1) \right) \times \right. \\ \times \left(G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_3, n_6}^{aa^+*}(\varepsilon_2) \right) + f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \left(G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_5, n_2}^{aa^+*}(\varepsilon_2) \right) \times \\ \left. \times \left(G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) - G_{n_4, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon_1) G_{n_3, n_6}^{aa^+*}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \right) \right\} \tilde{v}_{n_6, n'}^{(2)n_4, n_5}, \\ \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} = v_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} - v_{n', n_1}^{(2)n, n_2}, \quad (n \equiv ni\gamma).$$

Фонон-фононное взаимодействие описывается формулой [25]

$$\Sigma_{ph\ ph\ ni\alpha, n'i'\alpha'}(\varepsilon) = -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \coth\left(\frac{\varepsilon'}{2\Theta}\right) \Phi_{\alpha\alpha_1\alpha_2} \begin{pmatrix} n & n_1 & n_2 \\ i & i_1 & i_2 \end{pmatrix} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ \left[G_{n_1 i_1 \alpha_1, n_3 i_3 \alpha_3}^{uu}(\varepsilon') - G_{n_3 i_3 \alpha_3, n_1 i_1 \alpha_1}^{uu*}(\varepsilon') \right] G_{n_2 i_2 \alpha_2, n_4 i_4 \alpha_4}^{uu}(\varepsilon - \varepsilon') - G_{n_1 i_1 \alpha_1, n_3 i_3 \alpha_3}^{uu}(\varepsilon') \times \right. \\ & \left. \times \left[G_{n_2 i_2 \alpha_2, n_4 i_4 \alpha_4}^{uu}(\varepsilon - \varepsilon') - G_{n_4 i_4 \alpha_4, n_2 i_2 \alpha_2}^{uu*}(\varepsilon - \varepsilon') \right] \right\} \Phi_{\alpha_3 \alpha' \alpha_4} \begin{pmatrix} n_3 & n' & n_4 \\ i_3 & i' & i_4 \end{pmatrix}. \quad (25) \end{aligned}$$

При получении выражений (22)–(25) для массовых операторов вершинные части брались для простоты в нулевом приближении. Выражения (21) для функций Грина $G^{uu}(\varepsilon)$, $G^{PP}(\varepsilon)$ получены при условии

$$\left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Delta \Phi + \Sigma_{ph e}(\varepsilon) + \Sigma_{ph ph}(\varepsilon) \right)_{n i \alpha, n' i' \alpha'} \left/ \Phi_{\alpha \alpha'}^{(0)} \begin{pmatrix} n & n' \\ i & i' \end{pmatrix} \right. \ll 1.$$

При этом в разложении функции Грина $G^{Pu}(\varepsilon)$ (18) по указанному малому параметру сохранялся нулевой член разложения $G_0^{Pu}(\varepsilon)$, член, пропорциональный первой степени отмеченного малого параметра и пренебрегалось членами, которые пропорциональны второй и более высокой степеням.

Для получения плотностей состояний подсистем электронов и фононов, необходимо усреднить выражения (21) по расположениям атомов в узлах решетки. В результате для плотности электронных состояний на один атом можно написать

$$g_e(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi \nu N} \text{Im Sp} \langle G^{aa^*}(\varepsilon) \rangle_c, \quad (26)$$

а для плотности состояний подсистемы фононов

$$g_{ph}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi \nu N} 2 \frac{\varepsilon}{\hbar^2} M_A \text{Im Sp} \langle G^{uu}(\varepsilon) \rangle_c. \quad (27)$$

В выражениях (26), (27) скобки $\langle \dots \rangle_c$ означают усреднение по разным расположениям атомов (конфигурационное усреднение), N — число элементарных ячеек, ν — число атомов в элементарной ячейке. Для сокращения записи в дальнейшем индекс «с» возле скобки $\langle \dots \rangle_c$ будет опускаться.

Ниже будет показано, что при учете сильных электронных корреляций конфигурационное усреднение включает усреднение как по расположению атомов разного сорта, так и по ориентации локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

Выражения (21) отличаются от соответствующих выражений для функции Грина одночастичных гамильтонианов неупорядоченной системы лишь видом массовых операторов. В связи с этим для выполнения конфигурационного усреднения в формулах (26), (27) воспользуемся хорошо известными методами теории неупорядо-

ченных систем [18, 19].

Выполним кластерное разложение для функций Грина $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$ в выражениях (21)–(25), представив массовые операторы в виде суммы одноузельных операторов и выбрав как нулевое одноузельное приближение функции Грина эффективной среды. Указанное разложение является обобщением кластерного разложения для функции Грина $G^{aa^+}(\varepsilon)$ одночастичного гамильтониана [18, 19].

Функцию Грина эффективной среды для подсистемы электронов определим выражением

$$\tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon) = \left[[G_0^{aa^+}(\varepsilon)]^{-1} - \left(\Sigma_{eph}^A(\varepsilon) + \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) + \sigma_e(\varepsilon) \right) \right]^{-1}, \quad (28)$$

где массовый оператор электрон-фононного взаимодействия чистого кристалла

$$\Sigma_{eph}^A(\varepsilon) = \sum_{n_1 i_1, n_2 i_2} \Sigma_{eph}^{An_1 i_1, An_2 i_2}(\varepsilon).$$

Величины $\Sigma_{eph}^{An_1 i_1, An_2 i_2}(\varepsilon)$ определяются выражением (22), в котором функции Грина неупорядоченного кристалла заменены функциями Грина эффективной среды.

Функцию Грина эффективной среды для подсистемы фононов зададим выражением

$$\tilde{G}^{uu}(\varepsilon) = \left[[G_0^{uu}(\varepsilon)]^{-1} - \left(\Sigma_{phe}^A(\varepsilon) + \Sigma_{phph}^A(\varepsilon) + \sigma_{ph}(\varepsilon) \right) \right]^{-1}, \quad (29)$$

где величины $\Sigma_{phe}^A(\varepsilon)$, $\Sigma_{phph}^A(\varepsilon)$ определены аналогично $\Sigma_{eph}^A(\varepsilon)$.

В выражениях (28), (29), $\sigma_{ph}(\varepsilon)$ — потенциалы эффективной среды (когерентные потенциалы), значения которых будут отмечены ниже.

Функции Грина (21) удовлетворяют известному уравнению Дайсона

$$G(\varepsilon) = \tilde{G}(\varepsilon) + \tilde{G}(\varepsilon) \tilde{\Sigma}(\varepsilon) G(\varepsilon), \quad (30)$$

где для подсистемы электронов

$$\tilde{\Sigma}(\varepsilon) = w + \Sigma_{eph}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon) - \Sigma_{eph}^A(\varepsilon) - \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) - \sigma_e(\varepsilon), \quad (31)$$

а для подсистемы фононов

$$\tilde{\Sigma}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Delta \Phi + \Sigma_{phe}(\varepsilon) + \Sigma_{phph}(\varepsilon) - \Sigma_{phe}^A(\varepsilon) - \Sigma_{phph}^A(\varepsilon) - \sigma_{ph}(\varepsilon). \quad (32)$$

Оператор T -матрицы рассеяния определяется соотношением

$$G(\varepsilon) = \tilde{G}(\varepsilon) + \tilde{G}(\varepsilon) T(\varepsilon) \tilde{G}(\varepsilon) \quad (33)$$

и удовлетворяет уравнению

$$T(\varepsilon) = \tilde{\Sigma}(\varepsilon) + \tilde{\Sigma}(\varepsilon) \tilde{G}(\varepsilon) T(\varepsilon),$$

которое следует из уравнений (30) и (33).

Представим массовые операторы в виде суммы одноузельных операторов

$$\tilde{\Sigma}(\varepsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1}(\varepsilon), \quad (34)$$

получим для оператора T -матрицы рассеяния выражение

$$T(\varepsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} T^{n_1 i_1}(\varepsilon), \quad (35)$$

где

$$T^{n_1 i_1} = t^{n_1 i_1} + t^{n_1 i_1} \tilde{G} \sum_{(n_2 i_2) \neq (n_1 i_1)} T^{n_2 i_2}, \quad (36)$$

$t^{n_1 i_1}$ — оператор рассеяния на одном узле, определяемый выражением

$$t^{n_1 i_1} = [I - \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1} \tilde{G}]^{-1} \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1}. \quad (37)$$

Решая систему уравнений (36) относительно оператора $T^{n_1 i_1}$ и подставляя результат в (35), T -матрицу рассеяния можно представить в виде ряда, члены которого описывают рассеяние на кластерах с разным числом узлов (см., например, [18]):

$$T = \sum_{(n_1 i_1)} t^{n_1 i_1} + \sum_{(n_1 i_1) \neq (n_2 i_2)} T^{(2) n_1 i_1, n_2 i_2} + \dots \quad (38)$$

Здесь

$$T^{(2) n_1 i_1, n_2 i_2} = [I - t^{n_1 i_1} \tilde{G} t^{n_2 i_2} \tilde{G}]^{-1} t^{n_1 i_1} \tilde{G} t^{n_2 i_2} [I + \tilde{G} t^{n_1 i_1}].$$

Величины $t^{n_1 i_1}$, $T^{(2) n_1 i_1, n_2 i_2}$ в выражении (38) зависят от статических смещений атомов из положения равновесия согласно формулам (37), (31) и (11). Функция распределения по статическим смещениям атомов имеет резкий пик в области наиболее вероятных значений смещений. В связи с этим статические смещения в выражении (11) можно заменить их средними значениями. Средние статические смещения атомов в узлах $(n_1 i_1)$ и $(n_2 i_2)$ соответственно равны

$$\bar{u}_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} = \left\langle u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} \right\rangle^{1/2},$$

$$\bar{u}_\alpha^s \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} = \left\langle u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} \right\rangle / \left\langle u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_\alpha^s \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} \right\rangle^{1/2}. \quad (39)$$

Воспользуемся теорией статических смещений атомов, развитой в работах Кривоглаза [32]. В приближении упругого изотропного континуума для бинарных сплавов с близким атомным порядком можно написать

$$\left\langle u_\alpha^s(n_1) u_\alpha^s(n_2) \right\rangle = c(1-c) \sum_{\mathbf{k}} A_\alpha^2(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(r_{n_2} - r_{n_1})}, \quad (40)$$

где

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \frac{a_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}}{|\mathbf{k}|}, \quad a_{\mathbf{k}} = \frac{1+\sigma}{3(1-\sigma)} \frac{1}{V_1} \frac{\partial V_1}{\partial c}, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|},$$

$\varepsilon_{\mathbf{k}} = c(1-c)\alpha_{\mathbf{k}}$ — изображение Фурье параметров парных межатомных корреляций $\varepsilon_{n_1 n_2}$, равновесные значения которых определяются из условия минимума свободной энергии сплава; $\alpha_{\mathbf{k}}$ — изображение фурье-параметра ближнего порядка Каули [32]; $a_{\mathbf{k}}$ — параметр статических искажений; σ — коэффициент Пуассона; V_1 — объем примитивной ячейки; волновой вектор \mathbf{k} изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна. Производная от объема элементарной ячейки по концентрации $\partial V_1 / \partial c$ может быть рассчитана из условия минимума свободной энергии сплава.

Согласно выражению (33), конфигурационное среднее от функции Грина $G(\varepsilon)$ выражается через среднее от T -матрицы рассеяния. В работе [25] установлено, что вклады в усредненную функцию Грина $\langle G(\varepsilon) \rangle$ процессов рассеяния элементарных возбуждений на кластерах уменьшаются с увеличением числа узлов в кластере за некоторыми малыми параметрами. Исследование этих параметров показывает, что они являются малыми в широкой области изменения характеристик неупорядоченной системы, включая концентрацию компонентов, за исключением узких интервалов значений энергии на краях энергетических зон.

Когерентные потенциалы определяются из условия $\langle t^{0i} \rangle = 0$ и удовлетворяют системе связанных уравнений

$$\begin{aligned} \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) &= \left\langle [1 - (\Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon)) \tilde{G}^{aa^*}]^{-1} \right\rangle \left\langle [1 - (\Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon)) \tilde{G}^{aa^*}]^{-1} \Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) \right\rangle, \\ \sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon) &= \left\langle [1 - (\Sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon)) \tilde{G}^{uu}]^{-1} \right\rangle \left\langle [1 - (\Sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon)) \tilde{G}^{uu}]^{-1} \Sigma_{ph}^{0i_1}(\varepsilon) \right\rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Функция Грина эффективной среды $\tilde{G}(\varepsilon)$ определяется из выраже-

ния

$$\tilde{G}_{ni\gamma, n'i'\gamma'}(\varepsilon) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \bar{\rho}_{i'})}, \quad (42)$$

где величины $\tilde{G}_{i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ определяют функцию Грина в \mathbf{k} -изображении.

Для подсистемы электронов функции $\tilde{G}_{i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ являются элементами матрицы

$$\tilde{G}^{aa^+}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \left\| \varepsilon \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{ii'} - h_{i\gamma, i'\gamma'}^{(0)}(\mathbf{k}) - \sum_{e\ ph}^A \sigma_{e\ i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon) - \tilde{\Sigma}_{ee\ i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon) - \sigma_{e\ i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon) \right\|^{-1}, \quad (43)$$

где

$$\sigma_{e\ i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \sum_{i_1} \sum_{n, n'} \sigma_{e\ ni\gamma, n'i'\gamma'}^{0i_1}(\varepsilon) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \bar{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \bar{\rho}_{i'})}.$$

Функция Грина эффективной среды $\tilde{G}^{uu}(\varepsilon)$ следует из выражения (19) заменой величин $e_{\alpha} \left(i \left| \begin{smallmatrix} \mathbf{k} \\ j \end{smallmatrix} \right. \right)$, $\omega_j^2(\mathbf{k})$ на $\tilde{e}_{\alpha} \left(i \left| \begin{smallmatrix} \mathbf{k} \\ j \end{smallmatrix} \right. \right)$, $\tilde{\omega}_j^2(\mathbf{k})$, где

$\tilde{e}_{\alpha} \left(i \left| \begin{smallmatrix} \mathbf{k} \\ j \end{smallmatrix} \right. \right)$, $\tilde{\omega}_j^2(\mathbf{k})$ — соответственно собственные векторы и собственные значения динамической матрицы $\tilde{D}_{\alpha\alpha'} \left(i \left| \begin{smallmatrix} \mathbf{k} \\ i' \end{smallmatrix} \right. \right)$, которая получает-

ся из выражения (20) заменой $\Phi_{\alpha\alpha'}^{AA} \left(\begin{smallmatrix} 0 & n' \\ i & i' \end{smallmatrix} \right)$ на

$$\Phi_{\alpha\alpha'}^{AA} \left(\begin{smallmatrix} 0 & n' \\ i & i' \end{smallmatrix} \right) + \sum_{ph\ e}^A \sigma_{0i\alpha, n'i'\alpha'}(\varepsilon) + \sum_{ph}^A \sigma_{ph\ 0i\alpha, n'i'\alpha'}(\varepsilon) + \sigma_{ph\ 0i\alpha, n'i'\alpha'}^{0i}(\varepsilon).$$

4. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Термодинамический потенциал системы определяется выражением (см. (12))

$$\Omega = -\Theta \ln \text{Sp}(e^{-\mathbf{H}/\Theta}). \quad (44)$$

Воспользовавшись формулой (14), из (44) получим

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega', \quad (45)$$

где $\Omega' = -\Theta \ln \langle \sigma(1/\Theta) \rangle_0$.

Термодинамический потенциал Ω_0 в формуле (45) в отсутствие взаимодействия можно записать в виде

$$\Omega_0 = \Omega_c + \Omega_{0e} + \Omega_{0ph}. \quad (46)$$

Термодинамический потенциал электронной подсистемы

$$\Omega_{0e} = -vN\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{(\mu_e - \varepsilon)/\Theta}) g_{0e}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (47)$$

Термодинамический потенциал подсистемы фононов

$$\Omega_{0ph} = vN\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 - e^{-\varepsilon/\Theta}) g_{0ph}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (48)$$

В выражениях (47), (48) плотности $g_{0e}(\varepsilon)$, $g_{0ph}(\varepsilon)$ даются формулами (26), (27), в которых $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$ заменены функциями Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$, $G_0^{uu}(\varepsilon)$.

Конфигурационная составляющая термодинамического потенциала Ω_c в формуле (46), зависящая от распределения атомов разного сорта по узлам кристаллической решетки, есть

$$\Omega_c = \langle \Phi_0 \rangle - \Theta S_c, \quad (49)$$

где S_c — конфигурационная энтропия.

Добавка к термодинамическому потенциалу, обусловленная вкладами процессов рассеяния электронов и фононов, равна [25]

$$\begin{aligned} \Omega' = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon) \text{Sp} \left\langle \left(w(\lambda) + \Sigma_{eph}(\varepsilon, \lambda) + \Sigma_{ee}(\varepsilon, \lambda) \right) G^{aa^+}(\varepsilon, \lambda) \right\rangle + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \text{cth} \left(\frac{\varepsilon}{2\Theta} \right) \text{Sp} \left\langle \Delta M^{-1}(\lambda) G^{PP}(\varepsilon, \lambda) + \left(\Delta \Phi(\lambda) + \Sigma_{phph}(\varepsilon, \lambda) \right) G^{uu}(\varepsilon, \lambda) \right\rangle \right], \quad (50) \end{aligned}$$

где $f(\varepsilon)$ — функция Ферми.

В пренебрежении электрон-фононным, электрон-электронным и фонон-фононным взаимодействиями выражение (45) для термодинамического потенциала существенно упрощается. Полагая в (50) $\Sigma_{eph}(\varepsilon) = \Sigma_{ee}(\varepsilon) = \Sigma_{phph}(\varepsilon) = 0$, разлагая функции Грина $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$ в степенной ряд (см. формулу (21)) и выполняя в интеграле по энергии интегрирование по частям, и делая циклические перестановки операторов под знаком Sp , придем к выражению [25]

$$\Omega = \Omega_c + \Omega_e + \Omega_{ph}, \quad (51)$$

где Ω_e , Ω_{ph} даются формулами (47), (48), в которых $g_{0e}(\varepsilon)$, $g_{0ph}(\varepsilon)$ заменены соответственно на $g_e(\varepsilon)$, $g_{ph}(\varepsilon)$ (см. (26), (27)).

При учете указанных выше взаимодействий выражение (51) может рассматриваться лишь как приближенное.

Свободная энергия F связана с термодинамическим потенциалом Ω соотношением

$$F = \Omega + \mu_e \langle N_e \rangle, \quad (52)$$

где $\langle N_e \rangle$ — среднее число электронов.

Уровень Ферми μ_e системы определяется из уравнения

$$\langle Z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \mu_e) g_e(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (53)$$

где $g_e(\varepsilon)$ дается формулой (26); $\langle Z \rangle = \langle N_e \rangle / \nu N$ — среднее число электронов, приходящихся на один атом.

5. ТЕНЗОР ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ

Для расчета тензора электропроводности воспользуемся формулой Кубо [33]

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{i\omega t - \varepsilon t} \langle J_\beta(\mathbf{0}) J_\alpha(t + i\hbar\tau) \rangle d\tau dt, \quad (54)$$

где J_α — оператор α -проекции плотности тока.

Из выражения (54) получаем

$$\text{Re} \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\hbar\omega} \left[G_r^{J_\alpha J_\beta}(\omega) - G_a^{J_\alpha J_\beta}(\omega) \right] \quad (55)$$

Выражение (55) получено в предположении отсутствия магнитного поля.

Для расчета спектральных представлений запаздывающей и опережающей функций Грина $G_r^{J_\alpha J_\beta}(\omega)$, $G_a^{J_\alpha J_\beta}(\omega)$ воспользуемся выражением для оператора плотности тока

$$J_\alpha(t) = e \int \Psi^+(\xi, t) v_\alpha \Psi(\xi, t) d\xi,$$

где $\Psi^+(\xi, t)$, $\Psi(\xi, t)$ — полевые операторы рождения и уничтожения электрона соответственно; v_α — оператор α -проекции скорости; e —

заряд электрона; под интегрированием по ξ имеется в виду интегрирование по объему кристалла и суммирование по проекции спина s на ось z ; объем кристалла считается равным единице.

Расчет двухчастичных запаздывающей и опережающей функций Грина (электропроводности) (55) неупорядоченного кристалла базируется на методе температурных функций Грина. При этом используется известное соотношение между спектральными представлениями запаздывающей, опережающей и температурной функций Грина. Температурная функция Грина (17) в этом случае:

$$G^{J_\alpha J_\beta}(\tau, \tau') = \frac{e^2}{NV_1} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} v_{\alpha n_4 n_2} v_{\beta n_3 n_1} G''(n_1 \tau', n_2 \tau, n_3 \tau', n_4 \tau), \quad (56)$$

где двухчастичная функция Грина

$$G''(n_1 \tau', n_2 \tau, n_3 \tau', n_4 \tau) = \frac{\langle T_\tau a_{n_1}(\tau') a_{n_2}(\tau) a_{n_3}^+(\tau') a_{n_4}^+(\tau) \sigma(\frac{1}{6}) \rangle_0}{\langle \sigma(\frac{1}{6}) \rangle_0} \quad (n = ni\gamma), \quad (57)$$

V_1 — объем элементарной ячейки.

Раскладывая экспоненту в выражении (15) для $\sigma(\tau)$ в ряд по степеням $H_{\text{int}}(\tau)$, подставляя результат в (57) и используя теорему Вика [28, 29], для расчета двухчастичной температурной функции Грина неупорядоченного кристалла можно построить диаграммную технику, аналогичную диаграммной технике для однородной системы [28]. Знаменатель в формуле (57) сократится с таким же множителем в числителе. При этом функции Грина системы выразятся в виде ряда только по связным диаграммам. Выполняя дальше преобразование Фурье и используя известные соотношения между спектральными представлениями температурной и временной функций Грина [28], путем аналитического продолжения на действительную ось получим с учетом (55) следующее выражение для действительной части тензора электропроводности системы

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = & \frac{e^2 \hbar}{4\pi N V_1 \varepsilon} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 [f(\varepsilon_1 + \varepsilon) - f(\varepsilon_1)] \text{Sp} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \times \right. \\ & \left. \times v_\beta K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \right], \quad (58) \end{aligned}$$

где

$$K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) = G^{aa^+}(\varepsilon_1^{s'}) v_\alpha G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon), \quad G^{aa^+}(\varepsilon_1^-) = G_a^{aa^+}(\varepsilon_1) = (G_r^{aa^+})^+(\varepsilon_1). \quad (59)$$

Вершинная часть двухчастичной функции Грина $\Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon)$ в формуле (58) в первом порядке по потенциалу парного электрон-

электронного взаимодействия $\tilde{v}_{n_3 n_4}^{(2)n_1 n_2}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) &= \frac{i}{2\pi} v_{\alpha n_4 n_2} v_{\beta n_3 n_1} \tilde{v}_{n_7 n_8}^{(2)n_5 n_6} \times \\ &\times \left\{ \left(G_{r n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right) \left(G_{r n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right) \right\} \times \\ &\times \left(G_{a n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) G_{r n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) - G_{r n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) G_{a n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) \right) + \\ &+ G_{a n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) \left(G_{r n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right) G_{a n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) \left(G_{r n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right) - \\ &- \left(G_{a n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) G_{r n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) - G_{r n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) G_{a n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \right) \times \\ &\times \left(G_{r n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right) \left(G_{r n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right) + \\ &+ \left(G_{r n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right) G_{r n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \times \\ &\times \left(G_{r n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right) G_{r n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) - \left(G_{r n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a n_1 n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right) G_{a n_2 n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \times \\ &\times \left(G_{r n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a n_7 n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right) G_{a n_8 n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) \left. \right\}. \quad (60) \end{aligned}$$

Выражение (60) написано в пренебрежении перенормировкой вершинной части массового оператора электрон-электронного взаимодействия.

Тензор электропроводности сплава $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ зависит от случайного расположения атомов разного сорта на узлах кристаллической решетки. Для расчета $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ воспользуемся свойством самоусреднения тензора электропроводности, в соответствии с которым значение $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ при бесконечном увеличении объема системы стремится к некоторой неслучайной величине, равной усредненному по разным расположениям атомов значению $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$. Выражения для функций Грина в формуле (59) для $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ отличаются от соответствующих выражений для функций Грина одночастичных гамильтонианов неупорядоченной системы лишь видом массовых операторов. В связи с этим, для расчета тензора электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ воспользуемся хорошо известными методами теории неупорядоченных систем [18]. В результате для тензора электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ получим

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{e^2 \hbar}{4\pi N V_1 \varepsilon} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 [f(\varepsilon_1 + \varepsilon) - f(\varepsilon_1)] \text{Sp} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \times \right. \\ &\times v_{\beta} \left\langle K(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \left(\Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \right) \right\rangle, \quad (61) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
v_\beta \langle K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \rangle &= v_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
+ \tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \langle T(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \rangle &+ \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \langle T(\varepsilon_1^s) \rangle + \\
+ \tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_\beta, \varepsilon_1^s) \langle T(\varepsilon_1^s) \rangle \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) &T(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \rangle, \\
\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) &= \tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon).
\end{aligned}$$

Оператор α -проекции скорости электрона v_α в формуле (61) дается выражением $v_{\alpha i \gamma, i' \gamma'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{i \gamma, i' \gamma'}^{(0)}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}$.

В приближении когерентного потенциала

$$\langle \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \rangle \approx \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon), \quad (62)$$

где $\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon)$ получаем из выражения (60) путем замены $G^{aa^+}(\varepsilon^s)$ на $\tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon^s)$.

6. ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ

Приведенные результаты позволяют учесть влияние сильных электронных корреляций на электронную структуру и свойства сплавов переходных металлов с узкими энергетическими зонами. Для этого учтем неоднородное распределение электронной плотности. В выражении для массового оператора электрон-электронного взаимодействия (24) число электронов $Z_{ni\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}$ в состоянии $(ni\gamma s)$, то есть число электронов на атом в узле (ni) и энергетической зоне γ для определенной проекции спина s , зависит от сорта атома λ и локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$ в данном узле (ni) . Значение $Z_{ni\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}$ определяется выражением (53), в котором плотность электронных состояний $g_e(\varepsilon)$ заменена условной парциальной плотностью состояний $g_{ni\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon)$ для энергетической зоны γ и проекции спина s .

Плотность состояний $g_{ni\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon)$ дается выражением

$$g_{ni\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle G_{ni\gamma s, ni\gamma s}^{aa^+}(\varepsilon) \rangle \Big|_{(ni) \in \lambda m_{\lambda i}}, \quad (63)$$

в котором усреднение проводится при условии, что в узле (ni) находится атом сорта λ , а проекция локализованного магнитного момента электрона равняется $m_{\lambda i}$. Обозначив вероятность указанного

события как $P_{ni}^{\lambda, m_{\lambda i}}$, можно написать $\sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{ni}^{\lambda, m_{\lambda i}} = 1$.

Можно записать уравнения

$$Z_{ni\gamma}^{\lambda, m_{\lambda i}} = Z_{ni\gamma s}^{\lambda, m_{\lambda i}} + Z_{ni\gamma, -s}^{\lambda, m_{\lambda i}}, \quad m_{\lambda i\gamma} = Z_{ni\gamma s}^{\lambda, m_{\lambda i}} - Z_{ni\gamma, -s}^{\lambda, m_{\lambda i}}, \quad (64)$$

где $Z_{ni}^{\lambda, m_{\lambda i}} = \sum_{\gamma} Z_{ni\gamma}^{\lambda, m_{\lambda i}}$ и $m_{\lambda i} = \sum_{\gamma} m_{\lambda i\gamma}$ — число электронов и значения проекции магнитного момента для атома сорта λ в узле (ni) .

Из выражений (64) следует, что вместе с флуктуациями локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$ в системе могут возникать флуктуации зарядовой плотности $Z_{ni}^{\lambda, m_{\lambda i}}$ относительно среднего значения $\langle Z \rangle$. Из уравнений (64) получим

$$Z_{ni\gamma s}^{\lambda, m_{\lambda i}} = \frac{Z_{ni\gamma}^{\lambda, m_{\lambda i}} + m_{\lambda i\gamma}}{2}, \quad Z_{ni\gamma, -s}^{\lambda, m_{\lambda i}} = \frac{Z_{ni\gamma}^{\lambda, m_{\lambda i}} - m_{\lambda i\gamma}}{2}.$$

Флуктуации локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$ возникают при достаточно больших значениях потенциала кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле $\tilde{v}_{ni\gamma-s, ni\gamma s}^{(2)}$ в выражении (24) для массового оператора электрон-электронного взаимодействия $\Sigma_{ee}(\varepsilon)$, которые имеют место в случае переходных металлов с узкими энергетическими зонами. В однозонном приближении эти эффекты описываются известной в теории магнетизма моделью Хаббарда, которая учитывает кулоновское отталкивание электронов с противоположными спинами на одном узле и взаимодействие электронов на соседних узлах.

Для расчета плотности электронных состояний (26) и плотности состояний подсистемы фононов (27) необходимо провести конфигурационное усреднение, которое включает усреднение, как по расположению атомов разного сорта, так и по ориентации локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

Как показано в работе [25], вклад процессов рассеяния в плотность состояний на кластерах убывает с увеличением числа узлов в кластере за некоторым малым параметром, который является малым в широкой области изменения характеристик системы (включая концентрацию компонентов), за исключением узких интервалов значений энергии на краях энергетических зон. Подставляя в (26) выражения (33), (38), для плотности электронных состояний в пренебрежении процессами рассеяния на кластерах из трех и более узлов получим

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{v} \sum_{i, \gamma, s, \lambda, m_{\lambda i}} P_{0i}^{\lambda, m_{\lambda i}} g_{0i\gamma s}^{\lambda, m_{\lambda i}}(\varepsilon),$$

где условная парциальная плотность состояний равна

$$\begin{aligned}
 g_{0i\gamma s}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon) = & -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{G}_{0i,0i} + \tilde{G}_{0i,0i} t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{0i,0i} + \sum_{\substack{(lj) \neq (0i) \\ \lambda', m_{\lambda j}}} P_{lj\ 0i}^{\lambda' m_{\lambda j} / \lambda m_{\lambda i}} \times \right. \\
 & \times \left[\tilde{G}_{0i,0i} \left[I - t_{0i}^{m_{\lambda i}} \tilde{G}_{0i,lj} t_{lj}^{m_{\lambda j}} \tilde{G}_{lj,0i} \right]^{-1} t_{0i}^{m_{\lambda i}} \tilde{G}_{0i,lj} t_{lj}^{m_{\lambda j}} \left(\tilde{G}_{lj,0i} + \tilde{G}_{lj,0i} t_{0i}^{m_{\lambda i}} \tilde{G}_{0i,0i} \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \tilde{G}_{0i,lj} \left[I - t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}} \tilde{G}_{lj,0i} t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{0i,lj} \right]^{-1} t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}} \tilde{G}_{lj,0i} t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \left(\tilde{G}_{0i,0i} + \tilde{G}_{0i,lj} t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}} \tilde{G}_{lj,0i} \right) \right] \right\}^{\gamma s, \gamma s} \quad (65)
 \end{aligned}$$

Величины, которые стоят в выражении (65), являются матрицами по отношению к индексам энергетических зон $\gamma_1 s_1$, $\gamma_2 s_2$. Тут $P_{lj\ 0i}^{\lambda' m_{\lambda j} / \lambda m_{\lambda i}}$ — условная вероятность найти в узле (lj) атом сорта λ' с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda j}$ при условии, что в узле $(0i)$ находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$, а $t_{ni}^{\lambda m_{\lambda i}}$ — значение матричных элементов одноцентровых операторов рассеяния для случая, когда в узле (ni) находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda i}$.

Представим вероятность нахождения атомов и локализованных магнитных моментов $m_{\lambda i}$ в узлах кристаллической решетки в выражениях (65) в виде

$$P_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} = P_{0i}^{\lambda} P_{0i}^{m_{\lambda i}}, \quad P_{lj\ 0i}^{\lambda' m_{\lambda j} / \lambda m_{\lambda i}} = P_{lj\ 0i}^{\lambda' / \lambda} P_{lj\ 0i}^{m_{\lambda j} / m_{\lambda i}}, \quad (66)$$

где $P_{0i}^{\lambda} = \langle c_{0i}^{\lambda} \rangle$ — вероятность заполнения узла $(0i)$ атомом сорта λ , $P_{0i}^{m_{\lambda i}} = \langle c_{0i}^{m_{\lambda i}} \rangle$ — вероятность того, что в узле $(0i)$ проекция локализованного магнитного момента на ось z равна $m_{\lambda i}$; $c_{ni}^{m_{\lambda i}}$ — случайные числа, которые принимают значение 1 или 0 в зависимости от того, равняется проекция магнитного момента в узле (ni) значению $m_{\lambda i}$ или нет.

Для кристаллов кубической симметрии с двумя сортами атомов:

$$P_{0i}^A = c_A - \frac{v_2}{v} \eta_a \quad \text{для } v_1 \text{ подрешеток I-го типа и } P_{0i}^A = c_A + \frac{v_1}{v} \eta_a \quad \text{для } v_2$$

подрешеток II-го типа; $P_{0i}^B = 1 - P_{0i}^A$; $v = v_1 + v_2$; $c_A, c_B = 1 - c_A$ — концентрации компонентов A, B сплава; η_a — параметр дальнего атомного порядка.

Для упрощения допустим, что проекции локализованного магнитного момента на ось z принимают значение $m_{\lambda i} = \mu_{\lambda i}^+, \mu_{\lambda i}^-$. Связь

вероятности $P_{0i}^{m_{\lambda i}}$ с параметром дальнего магнитного порядка η_m определяется выражениями: $P_{0i}^{\mu_{\lambda i}^+} = x_{\mu_{\lambda i}^+} - \frac{V_2}{V} \eta_m$ для v_1 подрешеток I-го типа и $P_{0i}^{\mu_{\lambda i}^+} = x_{\mu_{\lambda i}^+} + \frac{V_1}{V} \eta_m$ для v_2 подрешеток II-го типа. $P_{0i}^{\mu_{\lambda i}^-} = 1 - P_{0i}^{\mu_{\lambda i}^+}$; $x_{\mu_{\lambda i}^+}$, $x_{\mu_{\lambda i}^-} = 1 - x_{\mu_{\lambda i}^+}$ равны соответственно относительному числу узлов кристаллической решетки с проекциями локализованных магнитных моментов $\mu_{\lambda i}^+$, $\mu_{\lambda i}^-$.

Условные вероятности $P_{lj\ 0i}^{\lambda'/\lambda}$, $P_{lj\ 0i}^{m_{\lambda j}/m_{\lambda i}}$ определяются выражениями $P_{lj\ 0i}^{\lambda'/\lambda} = P_{0i}^{\lambda} P_{lj\ 0i}^{\lambda'/\lambda} = \langle c_{lj}^{\lambda'} c_{0i}^{\lambda} \rangle$, $P_{lj\ 0i}^{m_{\lambda j}/m_{\lambda i}} = P_{0i}^{m_{\lambda i}} P_{lj\ 0i}^{m_{\lambda j}/m_{\lambda i}} = \langle c_{lj}^{m_{\lambda j}} c_{0i}^{m_{\lambda i}} \rangle$ и связаны с параметрами парных межатомных корреляций и парных корреляций в ориентации локализованных магнитных моментов $\varepsilon_{lj\ 0i}^{BB}$, $\varepsilon_{lj\ 0i}^{\mu_{\lambda j}^+ \mu_{\lambda i}^-}$ соотношениями [25]:

$$P_{lj\ 0i}^{\lambda'/\lambda} = P_{lj}^{\lambda'} + \frac{\varepsilon_{lj\ 0i}^{BB}}{P_{0i}^{\lambda}} (\delta_{\lambda'B} - \delta_{\lambda'A}) (\delta_{\lambda B} - \delta_{\lambda A}),$$

$$P_{lj\ 0i}^{m_{\lambda j}/m_{\lambda i}} = P_{lj}^{m_{\lambda j}} + \frac{\varepsilon_{lj\ 0i}^{\mu_{\lambda j}^+ \mu_{\lambda i}^-}}{P_{0i}^{m_{\lambda i}}} \left(\delta_{m_{\lambda j}, \mu_{\lambda j}^+} - \delta_{m_{\lambda j}, \mu_{\lambda j}^-} \right) \left(\delta_{m_{\lambda i}, \mu_{\lambda i}^-} - \delta_{m_{\lambda i}, \mu_{\lambda i}^+} \right), \quad (67)$$

где $\delta_{\lambda\lambda'}$ символы Кронекера;

$$\varepsilon_{lj\ 0i}^{BB} = \langle (c_{lj}^B - c_j^B)(c_{0i}^B - c_i^B) \rangle, \quad \varepsilon_{lj\ 0i}^{\mu_{\lambda j}^+ \mu_{\lambda i}^-} = \langle (c_{lj}^{\mu_{\lambda j}^+} - c_j^{\mu_{\lambda j}^+})(c_{0i}^{\mu_{\lambda i}^-} - c_i^{\mu_{\lambda i}^-}) \rangle.$$

Таким образом, бинарный сплав характеризуется четырьмя типами параметров корреляции: двумя для атомной (η_a , $\varepsilon_{lj\ 0i}^{BB}$) и двумя для магнитной (η_m , $\varepsilon_{lj\ 0i}^{\mu_{\lambda j}^+ \mu_{\lambda i}^-}$) подсистем.

Функции Грина системы электронов и фононов (21) и свободная энергия F (52) зависят от чисел электронов на атом с различными значениями проекций спина электронов на выделенное направление, т.е. распределения локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

Конфигурационная энтропия сплава S_c в выражении (49) связана с вероятностями распределения атомов и локализованных магнитных моментов по узлам решетки $P_{n_{i_1} \dots n_{i_v}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1} \dots \lambda_v m_{\lambda_v i_v}}$ соотношением [34]

$$S_c = - \left[\sum_{\substack{(n_{i_1} \dots n_{i_v}) \\ \lambda_1}} P_{n_{i_1}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1}} \ln P_{n_{i_1}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1}} + \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{(n_{1i_1}) \neq (n_{2i_2}), \\ \lambda_1, \lambda_2}} P_{n_{1i_1}, n_{2i_2}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1} \lambda_2 m_{\lambda_2 i_2}} \ln \frac{P_{n_{1i_1}, n_{2i_2}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1} \lambda_2 m_{\lambda_2 i_2}}}{P_{n_{1i_1}}^{\lambda_1 m_{\lambda_1 i_1}} P_{n_{2i_2}}^{\lambda_2 m_{\lambda_2 i_2}}} + \dots \quad (68)$$

Равновесные значения проекций локализованных магнитных моментов $\mu_{\lambda i}^+$, $\mu_{\lambda i}^-$, параметров корреляции η_a , $\varepsilon_{lj 0i}^{BB}$, η_m , $\varepsilon_{lj 0i}^{\mu_{\lambda j}^+ \mu_{\lambda i}^-}$, а также относительное число узлов кристаллической решетки $x_{\mu_{\lambda i}^+}$ с проекциями локализованных магнитных моментов $\mu_{\lambda i}^+$ находятся из условия минимума свободной энергии. При отсутствии внешнего магнитного поля значения проекций $\mu_{\lambda i}^+$, $\mu_{\lambda i}^- = -\mu_{\lambda i}^+$ отвечают ориентации локализованных магнитных моментов вдоль и против оси z , а $x_{\mu_{\lambda i}^+} = x_{\mu_{\lambda i}^-} = 0,5$.

7. ТЕНЗОР ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СИСТЕМЫ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Для расчета тензора электропроводности необходимо в выражении (61) провести конфигурационное усреднение, которое включает усреднение, как по расположению атомов разного сорта, так и по ориентации локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

В пренебрежении процессами рассеяния на кластерах из трех и более узлов, вклады которых убывают с увеличением числа узлов в кластере по отмеченному выше малому параметру [25], получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \text{Sp} v_{\beta} \langle K(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \rangle &= \sum_{\gamma, s, i} \left\{ \left[v_{\beta} \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{0i0i} + \sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{0i}^{\lambda, m_{\lambda i}} \times \right. \\ &\times \sum_{\substack{lj \neq 0i \\ \lambda', m_{\lambda' j}}} P_{lj 0i}^{\lambda' m_{\lambda' j} / \lambda m_{\lambda i}} \left[\left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_{\beta}, \varepsilon_1^s) v_{\alpha} G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{0i0i} T_{(0i, lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \right. \\ &+ \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_{\beta}, \varepsilon_1^s) v_{\alpha} G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{0ilj} T_{(lj, 0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\ &+ \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) v_{\beta} G(\varepsilon_1^s) \right]_{0i0i} T_{(0i, lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) + \\ &+ \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) v_{\beta} G(\varepsilon_1^s) \right]_{0ilj} T_{(lj, 0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) + \\ &+ \tilde{K}_{0ilj}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_{\beta}, \varepsilon_1^s) (t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\ &+ t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(0i, lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + T_{(lj,0i)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
 & + T_{(lj,0i)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
 & + T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{0ilj}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \Big] \Big\}^{\gamma_s, \gamma_s} \quad (69)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 T_{(0i,lj)}^{(2n)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}} &= \left[I - t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{(0i,lj)} t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}} \tilde{G}_{(lj,0i)} \right]^{-1} t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{(0i,lj)} t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}}, \\
 T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}} &= T_{(0i,lj)}^{(2n)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}} \tilde{G}_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}.
 \end{aligned}$$

Величины, которые стоят в выражениях (69), являются матрицами по отношению к индексам энергетических зон $\gamma_1 s_1, \gamma_2 s_2$. Здесь s — индекс проекции спина электрона на ось z .

Среднее число электронов на атом в уравнении (53) для уровня Ферми дается выражением

$$\langle Z \rangle = \frac{1}{\nu} \sum_{i, \gamma, s, \lambda, m_i} P_{0i}^{\lambda, m_i} Z_{0i \gamma s}^{\lambda, m_i}.$$

В выражениях (61), (62), (69) для электропроводности учитывается рассеяние электронов на потенциалах ионных остовов разного сорта, статических смещениях атомов и флуктуациях спиновой и электронной плотности.

Статическая проводимость сплава получается из выражений (61), (62), (69) предельным переходом $\omega \rightarrow 0$. Таким образом, для статической проводимости имеем

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{e^2 \hbar}{4\pi V_1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \frac{\partial f(\varepsilon_1)}{\partial \varepsilon_1} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \sum_{\gamma, s, i} \left[\nu_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \right]_{0i0i} + \right. \\
 & + \sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{0i}^{\lambda, m_{\lambda i}} \sum_{\substack{lj \neq 0i \\ \lambda', m_{\lambda j}}} P_{lj 0i}^{\lambda' m_{\lambda j} / \lambda, m_{\lambda i}} \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s) \nu_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{0i0i} T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s) \nu_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{0ilj} T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \nu_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{0i0i} \times \\
 & \times T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^s) + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \nu_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{0ilj} T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) + \\
 & + \tilde{K}_{0ilj}(\varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s) (t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + t_{lj}^{\lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda j}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + T_{(lj,0i)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + T_{(lj,0i)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda'j} \lambda m_{\lambda d}}(\epsilon_1^s) \tilde{K}_{lj0i}(\epsilon_1^s, \nu_\alpha, \epsilon_1^{s'}) T_{(0i,lj)}^{(2d)\lambda m_{\lambda d} \lambda' m_{\lambda'j}}(\epsilon_1^{s'}) + \\
& + T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda'j} \lambda m_{\lambda d}}(\epsilon_1^s) \tilde{K}_{0ilj}(\epsilon_1^s, \nu_\alpha, \epsilon_1^{s'}) T_{(lj,0i)}^{(2n)\lambda m_{\lambda d} \lambda' m_{\lambda'j}}(\epsilon_1^{s'}) \Big] \Big\}^{sy, sy} + \\
& + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 d\epsilon_2 f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\epsilon_1, \epsilon_2; 0) \Big\}. \tag{70}
\end{aligned}$$

В выражении (70) для статической проводимости учитывается рассеяние электронов на потенциалах ионных остовов разного сорта, статических смещениях атомов и флуктуациях спиновой и электронной плотности.

8. ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

В качестве примера приведем расчет оптической проводимости эквивалентного сплава Fe–Co [47]. С целью исследования влияния атомного упорядочения на электронную структуру и электропроводность выполнен расчет для сплавов с различной степенью порядка. Матричные элементы гамильтониана сплава H (1) в многозонной s -, p -, d -модели сильной связи вычислены с использованием волновых функций и потенциалов изолированных атомов по методу Слэтера–Костера [35, 36]. Ортогонализация базиса выполнена по методу Лёвдина [37]. При расчете массового оператора электрон-фононного взаимодействия (22) функция Грина фононов для простоты полагалась равной функции Грина идеального кристалла.

На рисунке 1 показана плотность электронных состояний, рассчитанная по формуле (65) для сплава Fe_{0,5}Co_{0,5} (ОЦК-решетка) при

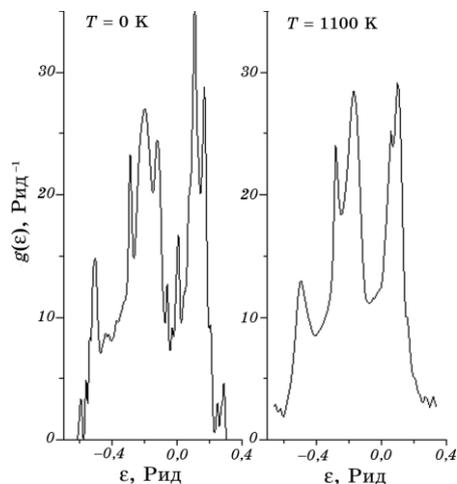


Рис. 1. Плотности электронных состояний сплава Fe_{0,5}Co_{0,5} при разных значениях T .

температурах $T = 0$ К и $T = 1100$ К.

Расчет выполнен с учетом локализованных магнитных моментов, параметров корреляции в расположении атомов и ориентации магнитных моментов на узлах решетки путем минимизации свободной энергии сплава (52). В указанной области температур сплав находится в ферромагнитной фазе. При $T = 0$ К сплав полностью упорядочен (параметр дальнего порядка $\eta_a = 1$). При $T = 1100$ К сплав находится в неупорядоченной фазе $\eta_a = 0$. Локализованный магнитный момент на атоме железа равен $\mu_{\text{Fe}} = 2,8\mu_B$, на атоме кобальта — $\mu_{\text{Co}} = 1,4\mu_B$. На рисунке 1 энергия отсчитывается от уровня Ферми.

Оптическая проводимость сплавов приведена на рис. 2. Значение оптической проводимости для полностью упорядоченного сплава при $T = 0$ К изображено сплошной кривой, для полностью разупорядоченного сплава при $T = 1100$ К — штриховой кривой.

На рисунке 3 представлены экспериментальные значения оптической проводимости сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, закаленных от температур $T = 573$ К и $T = 773$ К. Сплав, закаленный от температуры $T = 573$ К, имеет большую степень дальнего порядка. В соответствии со сказанным выше, щель в энергетическом спектре электронов для этого сплава имеет более выраженный характер. Это приводит к более выраженному пику на кривой энергетической зависимости оптической проводимости, положение левого склона которого соответствует положению правого края энергетической щели (рис. 1).

Из рисунков 2, 3 следует, что теоретические значения оптической проводимости удовлетворительно описывают экспериментальные данные. Сопоставление экспериментальных и теоретических результатов дает объяснение микроскопического механизма

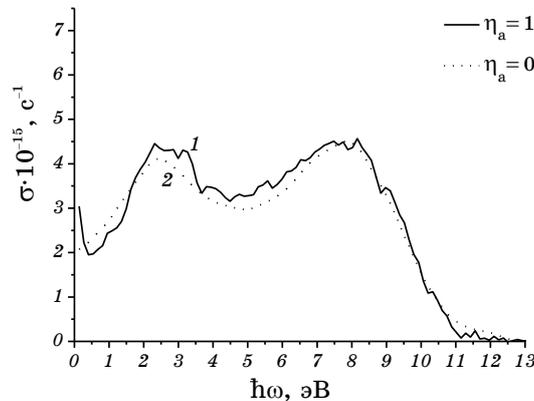


Рис. 2. Оптическая проводимость сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$: 1 — для полностью упорядоченного сплава при $T = 0$ К, 2 — для полностью разупорядоченного сплава при $T = 1100$ К.

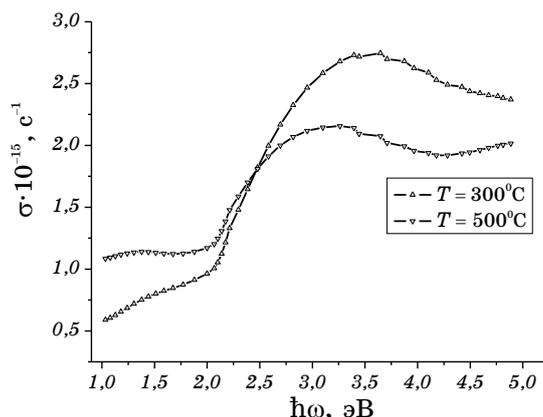


Рис. 3. Оптическая проводимость сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (экспериментальные значения [38]).

влияния атомного упорядочения на оптическую проводимость сплава, связанного с возникновением щели в энергетическом спектре электронов.

9. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

Приведем расчет температурной зависимости статической электропроводности сплавов $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ и $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ [49]. В расчете учтено, что для ферромагнетика параметр дальнего магнитного порядка $\eta_m = 0$ и что в отсутствие внешнего магнитного поля относительные доли узлов кристаллической решетки с противоположными проекциями локализованных магнитных моментов одинаковы ($x_{\mu^+} = x_{\mu^-} = 0,5$), а также для простоты полагалось, что величины $\varepsilon_{ij\ 0i}^{\mu_j\ \mu_i} = \varepsilon_{ij\ 0i}^{\mu_j\ \mu_i}$, т.е. не зависят от сорта атома.

Статическая электропроводность систем в приближении слабого рассеяния и в пренебрежении процессами рассеяния электронов с переходом их в состояние другой энергетической зоны выражается через мнимую часть $\text{Im}(\Sigma_\gamma(\varepsilon_F))$ массового оператора $\Sigma_\gamma(\varepsilon_F)$ конфигурационно усредненной функции Грина, плотность состояний на атом на уровне Ферми $g_\gamma(\varepsilon_F)$, вычисленную в приближении когерентного потенциала, и α -компоненту скорости электрона $v_{\alpha\gamma}(\varepsilon_F)$ [39]:

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \sum_{\gamma} \frac{e^2 \hbar}{3\Omega_0} \frac{g_\gamma(\varepsilon_F) v_{\alpha\gamma}^2(\varepsilon_F)}{|\text{Im}(\Sigma_\gamma(\varepsilon_F))|}. \quad (71)$$

При выводе формулы (71) конфигурационное среднее от произведения одночастичных функций Грина, т.е. двухчастичной функции Грина, приближенно представлено в виде произведения конфигурационно усредненных одночастичных функций Грина.

Это простое выражение для систем с сильными электронными корреляциями заведомо не применимо. Тем не менее, оно позволяет качественно объяснить изменение электропроводности за счет выделения вкладов от изменения энергетического спектра электронов (плотности состояний на уровне Ферми $g(\varepsilon_F)$) и затухания электронных состояний $\tau = \hbar / |\text{Im} \sigma_e^{0i}(\varepsilon_F) + \text{Im} \Sigma_{eph}(\varepsilon_F)|$, которое обратно пропорционально сумме мнимых частей когерентного потенциала $\text{Im} \sigma_e^{0i}(\varepsilon_F)$ и массового оператора электрон-фононного взаимодействия $\text{Im} \Sigma_{eph}(\varepsilon_F) = \text{Im} \Sigma_{eph}^{Ani, Ani}(\varepsilon_F)$ при энергии электрона, равной энергии Ферми.

Исходя из таких соображений, в работе [40] аномально слабая температурная зависимость электропроводности сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ в диапазоне температур до 300 К объяснена взаимной компенсацией действия двух указанных факторов: влияния температуры на время релаксации и энергетический спектр электронов. Подобная слабая зависимость электросопротивления, согласно экспериментальным данным, имеет место не только для сплава стехиометрического состава. С целью уточнения природы этой низкотемпературной аномалии кинетических свойств узкозонных сплавов $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$ в данной работе проведены расчеты для сплава $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ и сравнение полученных результатов с данными для $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$.

На рисунке 4 приведены температурные зависимости времени

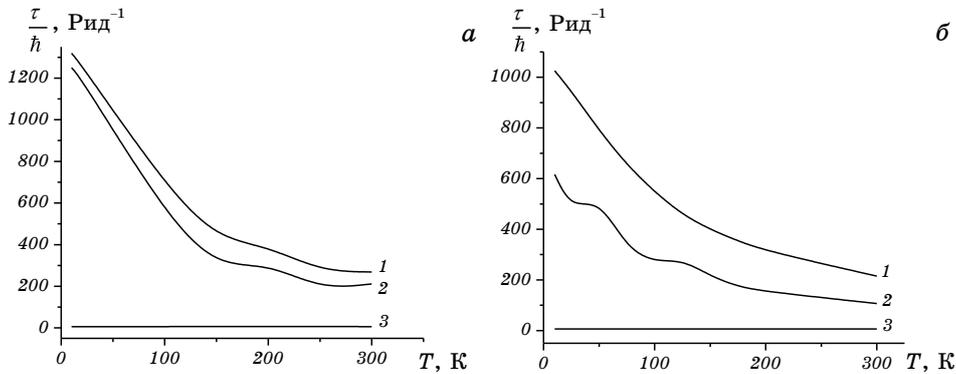


Рис. 4. Температурные зависимости времени релаксации τ для сплавов $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ (а) и $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (б) на уровне Ферми для s - (1), p - (2) и d -электронов (3).

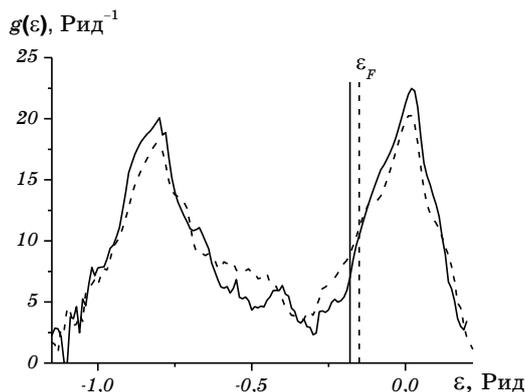


Рис. 5. Плотности электронных состояний сплавов $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (---) и $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ (—) при 300 К с учетом электрон-фононного взаимодействия.

релаксации τ для различных энергетических зон. Как показывают расчеты, основной вклад в электропроводность исследуемых сплавов дают p - и s -зоны, а вклад d -состояний не превышает 30%. Как видно из рис. 4, время релаксации с ростом температуры уменьшается. При условии неизменности энергетического спектра электропроводность, согласно (71), должна уменьшаться.

Однако установлено, что рассеяние электронов на колебаниях кристаллической решетки приводит к эффекту «замытия» энергетической квазищели на кривой плотности состояний [40]. Если уровень Ферми находится внутри квазищели (рис. 5), что имеет место для исследуемых сплавов, то влияние упомянутого эффекта сводится к увеличению плотности состояний на уровне Ферми (см.

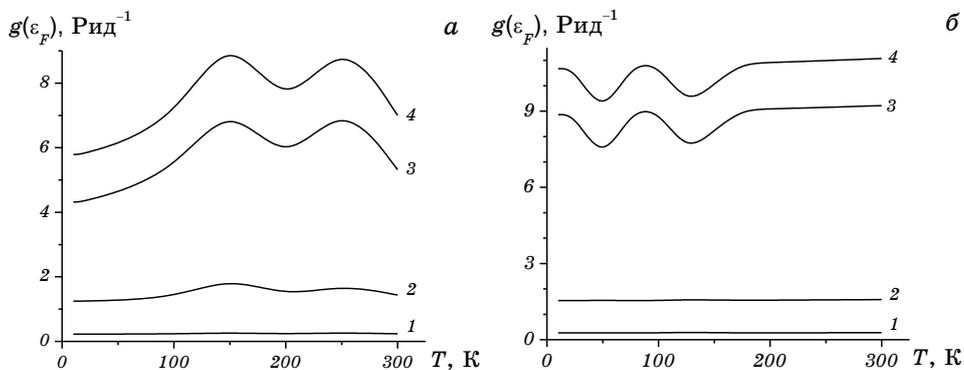


Рис. 6. Температурные зависимости плотности электронных состояний $g(\varepsilon_F)$ для сплавов $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ (а) и $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (б) на уровне Ферми для s - (1), p - (2) и d -электронов (3). Кривые 4 обозначают суммарные зависимости.

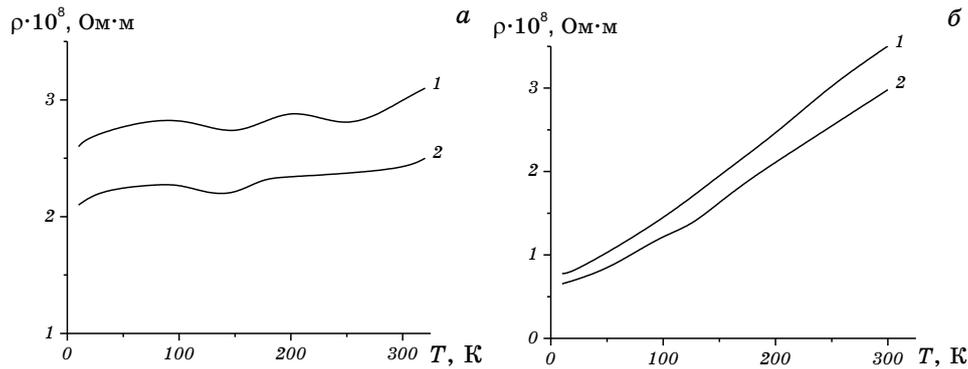


Рис. 7. Температурные зависимости удельного электросопротивления $\rho = 1 / \sigma_{zz}$, рассчитанные по формулам (70) (а) и (71) (б). Кривые 1 и 2 обозначают зависимости для сплавов $\text{Fe}_{0.88}\text{Co}_{0.12}$ и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ соответственно.

рис. 6, кривые 4). Тогда при доминировании этого фактора, согласно (71), может иметь место обратная зависимость — увеличение электропроводности с ростом температуры.

Эта конкуренция вкладов, приводящая к их компенсации, прослеживается как для сплава стехиометрического состава $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$, так и для $\text{Fe}_{0.88}\text{Co}_{0.12}$. Однако сравнение результатов расчетов электропроводности сплавов $\sigma_{\alpha\beta}$ по точной формуле (70) различного состава ($\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ и $\text{Fe}_{0.88}\text{Co}_{0.12}$) с результатами расчетов $\sigma_{\alpha\alpha}$ в приближении слабого рассеяния (71) показывает, что в температурном интервале от 0 до 300 К имеет место более сложная аномальная зависимость электросопротивления от температуры (рис. 7).

Полученное в приближении слабого рассеяния выражение (71) для электропроводности $\sigma_{\alpha\alpha}$, несмотря на конкуренцию вышеупомянутых вкладов, дает монотонное возрастание электросопротивления с увеличением температуры (рис. 7, б). В то же время расчеты по точной формуле (70) дают немонотонную слабо зависящую от температуры ($T \in 0-300$ К) зависимость электросопротивления (рис. 7, а).

Таким образом, выражение (71) лишь качественно описывает слабую температурную зависимость электросопротивления вышеуказанных сплавов. Для количественного описания электропроводности сплавов переходных металлов необходимо учитывать межзонные переходы при рассеянии электронов и выйти за рамки приближения слабого рассеяния.

Причиной слабой температурной зависимости электросопротивления сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$, кроме указанных конкурирующих факторов, является наличие в системе сильных электронных корреляций. Величина локализованных магнитных моментов уменьшается с возрастанием температуры. Увеличение температуры также приводит к уменьшению параметра парных магнитных корреляций (значе-

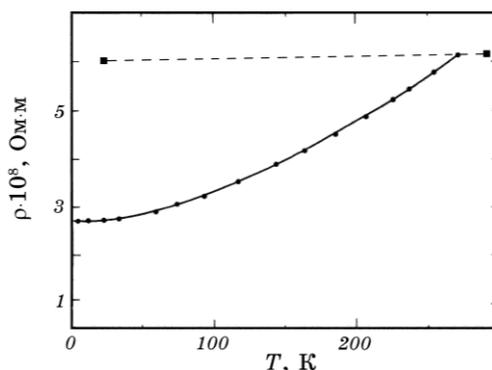


Рис. 8. Температурные зависимости удельного электросопротивления сплавов $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$: медленно охлажденного от 1012 К [41] (● ●) и отожженного при 1373 К [42, 43] (■ ■).

ния которого соответствуют ферромагнитной фазе). Указанные факторы также способствуют «замытию» квазищели, которое приводит к повышению плотности состояний на уровне Ферми. Немонотонное изменение плотности состояний на уровне Ферми с увеличением температуры (рис. 6, кривые 4) связано со сложной зависимостью плотности состояний от энергии в области квазищели, возникающей при магнитном и атомном упорядочениях.

Для сравнения на рис. 8 приведены данные экспериментальных исследований температурных зависимостей электросопротивления для медленно охлажденного от 1012 К сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ [41] и отожженного при 1373 К [42, 43] сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$. Результаты численных расчетов (рис. 7, кривые 2) качественно согласуются с экспериментальными данными (рис. 8) [41–43]. Экспериментальные значения электросопротивления сплава $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ [44] примерно в пять раз выше теоретических (см. рис. 7, а). Это может быть объяснено тем, что в экспериментальных исследованиях не контролировались атомная структура и морфология сплава. В связи с этим указанное расхождение теоретических и экспериментальных значений, возможно, связано с концентрационной неоднородностью исследованных образцов [45] и наличием нескольких фаз, поскольку на диаграмме состояний состав $\text{Fe}_{0,88}\text{Co}_{0,12}$ лежит вблизи двухфазной области $\alpha + \alpha_3$ [43].

Результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными. Это указывает на применимость данного подхода к исследованию энергетического спектра и свойств магнитоупорядочивающихся сплавов, связанных с возникновением квазищели в энергетическом спектре электронов.

Таким образом, установлена природа слабой температурной зависимости электросопротивления сплавов $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$, связанная с по-

ложением уровня Ферми в области квазищели в энергетическом спектре электронов, которая возникает благодаря магнитному и атомному упорядочениям.

Аномально слабое изменение электросопротивления сплавов $Fe_{1-c}Co_c$ при увеличении температуры от 0 до 300 К обусловлено не только уменьшением времени затухания электронных состояний, но и увеличением плотности состояний на уровне Ферми благодаря эффекту «замытия» энергетической квазищели при рассеянии электронов на колебаниях кристаллической решетки и магнитном разупорядочении сплавов.

10. КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

Приведем результаты расчетов энергетического спектра электронов и концентрационной зависимости статической электропроводности сплава Fe–Co [50]. В отсутствие внешнего магнитного поля концентрации узлов кристаллической решетки с противоположными проекциями локализованных магнитных моментов одинаковы. При численных расчетах учтены только статические флуктуации зарядовой и спиновой плотностей.

Сплав Fe–Co относится к системам с сильными электронными корреляциями, в которых велико кулоновское взаимодействие между локализованными *d*-электронами. Это приводит к образованию кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов (рис. 9). Изменение химического состава приводит к изменению парциальных вкладов в плотность состояний. При этом изменяются, согласно выражениям (64), (53), величины локализованных магнитных моментов и значение плотности состояний на уровне

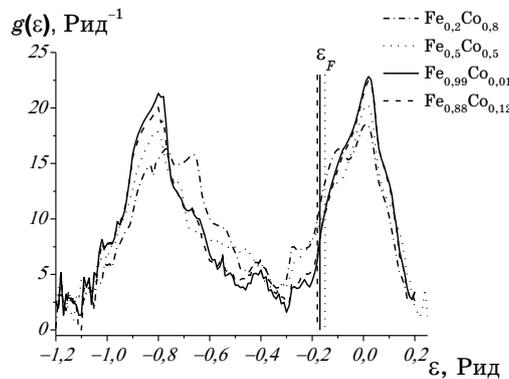


Рис. 9. Плотности электронных состояний сплава $Fe_{1-c}Co_c$ при разных значениях *c* и равновесных значений атомного и магнитного порядков (300 К).

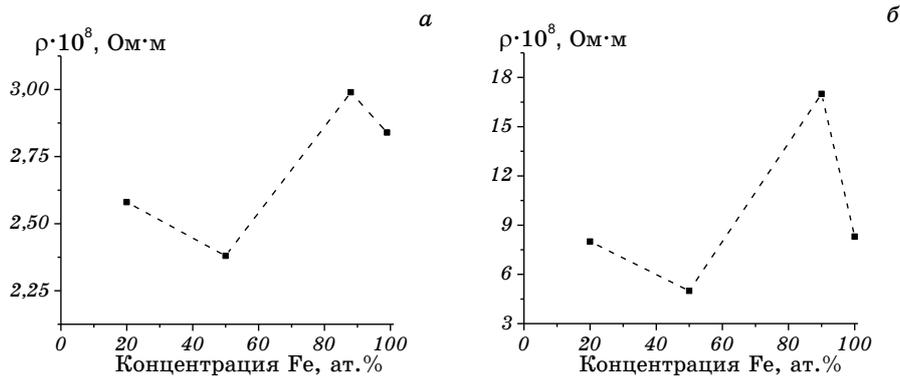


Рис. 10. Концентрационные зависимости удельного электросопротивления $\rho = 1 / \sigma_{zz}$ сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$ при $T = 300 \text{ К}$: *а* — рассчитанного по формуле (70); *б* — экспериментальные значения [47].

Ферми, лежащем в области кулоновской квазищели.

На рисунке 10, *а* приведена концентрационная зависимость электросопротивления сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$ при $T = 300 \text{ К}$. Для сравнения на рис. 10, *б* изображены экспериментальные значения удельного электросопротивления [44]. Как видно из рис. 10, теоретические значения находятся в качественном согласии с экспериментальными данными. Однако экспериментальные значения электросопротивления в среднем в три раза выше теоретических. Это может быть связано с концентрационной неоднородностью исследованных образцов [45] и наличием в них нескольких фаз [46].

Концентрационная зависимость для сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$ (рис. 10, *б*) не объясняется лишь предсказанной Смирновым [48, 39] зависимостью

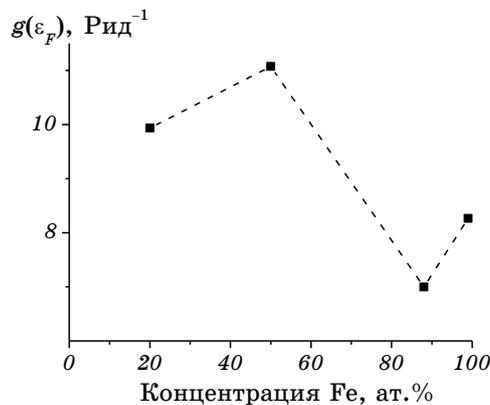


Рис. 11. Концентрационная зависимость плотности электронных состояний на уровне Ферми сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$.

электросопротивления от параметров атомного порядка: с ростом атомного упорядочения электросопротивление сплава уменьшается и принимает свое минимальное значение для максимально упорядоченного состояния. Как показывают расчеты, выполненные по формуле (70), электросопротивление сплава слабо зависит от параметров атомного порядка. Кроме того, минимум на концентрационной зависимости при стехиометрическом составе сплава наблюдается как при низких температурах, так и при температурах выше точки фазового перехода порядок–беспорядок [42] и не может быть объяснен лишь влиянием атомного упорядочения. При этом имеет место существенная зависимость энергетического спектра электронов и электропроводности системы от величины магнитных моментов и параметров корреляций в их ориентации. Это указывает на определяющую роль сильных электронных корреляций в концентрационной зависимости электросопротивления сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$.

Таким образом, концентрационная зависимость электросопротивления (рис. 10) определяется изменениями как плотности состояний на уровне Ферми, так и времени релаксации электронов, возникающими вследствие изменения величины и взаимной ориентации локализованных магнитных моментов при магнитном упорядочении. Увеличение плотности состояний на уровне Ферми (рис. 11), а также уменьшение локализованных магнитных моментов (рис. 12) приводят к уменьшению электросопротивления сплава, а обратное изменение указанных величин — к его увеличению.

Таким образом, электросопротивление сплавов $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$ слабо зависит от параметров атомного порядка. Немонотонная концентрационная зависимость электросопротивления указанных сплавов определяется сильными электронными корреляциями и обусловленным ими магнитным упорядочением.

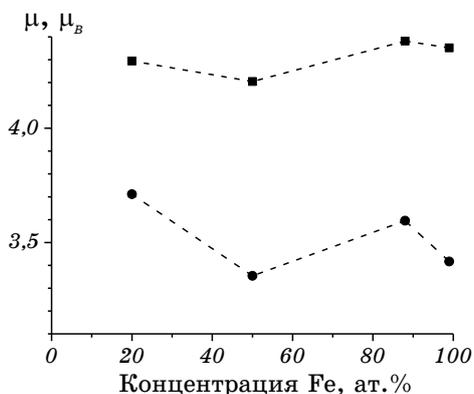


Рис. 12. Концентрационная зависимость локализованных магнитных моментов на атомах Fe (■ ■) и Co (● ●).

Уменьшение локализованных магнитных моментов и увеличение плотности состояний на уровне Ферми приводят к уменьшению электросопротивления сплава $\text{Fe}_{1-c}\text{Co}_c$, а обратное изменение указанных величин — к его увеличению.

11. ОБЛАСТИ ОДНОРОДНОГО МАГНИТНОГО БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА

Для исследования магнитного порядка необходимо определить вероятность $P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1} / m_{\lambda_2 i_2}}$ найти в узле $(n_1 i_1)$ локализованный магнитный момент с проекцией $m_{\lambda_1 i_1}$ при условии, что в узле $(n_2 i_2)$ находится локализованный магнитный момент с проекцией $m_{\lambda_2 i_2}$. Условная вероятность $P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1} / m_{\lambda_2 i_2}}$ связана с параметром парных магнитных корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1}^+ m_{\lambda_2 i_2}^+}$ выражением (67).

Пренебрегая корреляциями в ориентации магнитных моментов на трех и более узлах кристаллической решетки, по равновесным значениям $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{m_{\lambda_1 i_1}^+ m_{\lambda_2 i_2}^+}$ можно оценить размеры областей однородного магнитного порядка («магнитных доменов») из условий

$$\frac{1}{2} = (P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\mu_{\lambda_1 i_1}^+ / \mu_{\lambda_2 i_2}^+})^{k_{\uparrow}}, \quad \frac{1}{2} = (P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\mu_{\lambda_1 i_1}^- / \mu_{\lambda_2 i_2}^-})^{k_{\downarrow}}, \quad (72)$$

где k_{\uparrow} и k_{\downarrow} — числа частиц с проекциями магнитных моментов, имеющими знак μ^+ и μ^- соответственно, отсчитываются от центра «домена» до его границы. Зная период решетки a , можно определить линейные размеры «магнитных доменов»:

$$d_{\uparrow} = 2ak_{\uparrow} = 2a \frac{\ln(1/2)}{\ln\left(P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\mu_{\lambda_1 i_1}^+ / \mu_{\lambda_2 i_2}^+}\right)}, \quad d_{\downarrow} = 2ak_{\downarrow} = 2a \frac{\ln(1/2)}{\ln\left(P_{n_1 i_1 n_2 i_2}^{\mu_{\lambda_1 i_1}^- / \mu_{\lambda_2 i_2}^-}\right)}. \quad (73)$$

Магнитное фазовое состояние сплавов с сильными электронными корреляциями соответствует положению уровня Ферми относительно кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов [51]. Если уровень Ферми находится в центре указанной квазищели, то сплав является антиферромагнетиком, вне области квазищели — парамагнетиком. В случае, когда уровень Ферми лежит на краю квазищели в энергетическом спектре электронов, что имеет место для исследуемого сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (рис. 13), кристалл является ферромагнетиком. Фазовое состояние магнитных бинарных сплавов описывается параметрами корреляций атомной ($\eta_a, \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a$)

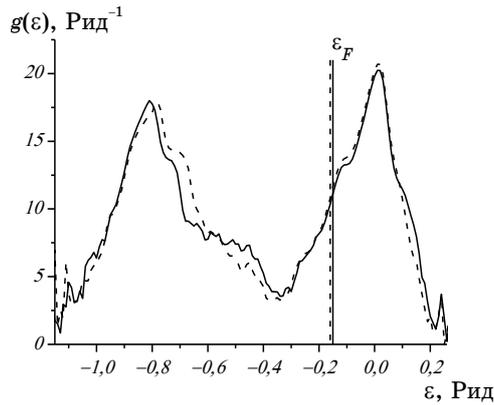


Рис. 13. Плотности электронных состояний сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ для равновесных параметров системы при температурах 300 К (—) и 500 К (---).

и магнитной ($\eta_m, \varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$) подсистем. При расчетах учтено, что для неупорядоченного сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ параметр дальнего атомного порядка $\eta_a = 0$. Равновесные значения параметров магнитных $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$, η_m и межатомных $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a$ корреляций получены из условия минимума свободной энергии F (52) (рис. 14).

Как следует из результатов расчета, неупорядоченный сплав $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ при $T = 1200$ К является ферромагнетиком со значениями параметра парных межатомных корреляций, близкими к макси-

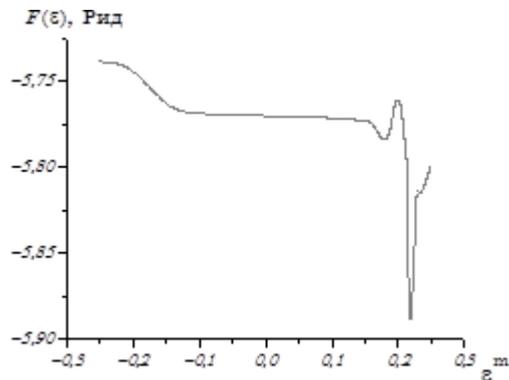


Рис. 14. Зависимость свободной энергии сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ от параметра парных магнитных корреляций ε^m при $T = 300$ К (для равновесного значения $\varepsilon^a = -0,25$). Равновесное значение параметра ближнего магнитного порядка соответствует $\varepsilon^m = 0,215$.

мальному значению ближнего атомного порядка ($\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^a = -0,25$).

Фазовые переходы сплавов с сильными электронными корреляциями обусловлены изменениями электронной структуры. Перестройка энергетического спектра электронов происходит при изменении температуры. Вследствие электрон-фононного взаимодействия увеличение температуры приводит к эффекту «замытия» квазищели в энергетическом спектре электронов, ширина которой определяется величиной локализованных магнитных моментов и параметрами корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$ в ориентации магнитных моментов на узлах кристаллической решетки (рис. 13) [25]. С увеличением температуры величины локализованных магнитных моментов и параметров парных магнитных корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$ уменьшаются вплоть до нулевого значения при достижении температуры $\cong 1200$ К (рис. 15). Для ферромагнитной фазы $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m > 0$. Теоретическое значение температуры Кюри T_C для сплава Fe–Co, определенное из рис. 15, близко к экспериментальному значению $T_C = 1250$ К [52, 53].

Используя рассчитанные при разных температурах равновесные значения параметров парных магнитных корреляций $\varepsilon_{n_1 i_1 n_2 i_2}^m$, при помощи формул (67), (73) можно оценить размеры «магнитных доменов» в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ в диапазоне температур 0–1200 К. Из рисунка 16 видно, что с ростом температуры «магнитные домены» уменьшаются до практически нулевого размера при температурах в окрестности T_C ($d_{\uparrow} = d_{\downarrow} \equiv d$). Это связано с уменьшением корреляции в ориентации магнитных моментов (рис. 15).

Известно, что температура Кюри является точкой фазового пере-

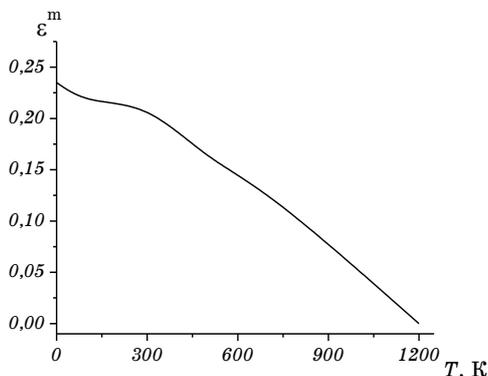


Рис. 15. Температурная зависимость равновесных значений параметра парных магнитных корреляций ε^m сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$.

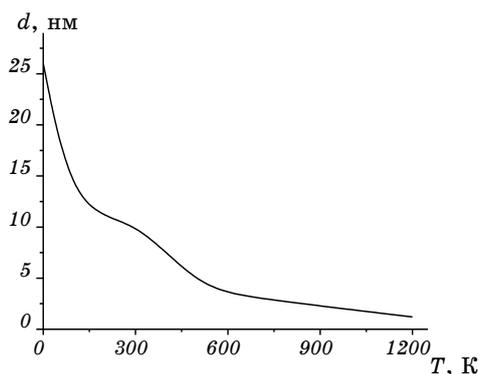


Рис. 16. Температурная зависимость линейных размеров d «магнитных доменов» сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$.

хода ферромагнетик–парамагнетик (магнитный порядок–беспорядок). Такой переход является следствием разрушения упорядоченности в ориентации магнитных моментов атомов из-за тепловых колебаний атомов в узлах кристаллической решетки. Однако, в области температур, близких к температуре такого фазового перехода, существенную роль начинают играть корреляции более высоких порядков, нежели парные, а потому предложенный в данной работе метод становится практически неприменимым к исследованию близких окрестностей точек фазовых переходов типа магнитный порядок–беспорядок.

Полученные результаты хорошо согласуются с известными закономерностями изменения размеров «магнитных доменов» при изменении температуры. Размер «магнитного домена» при комнатной температуре, оцененный по параметру парных магнитных корреляций, близок к экспериментально определенному среднему размеру области однородности в неупорядоченном (закаленном от высоких температур) сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ [45]. Это указывает на применимость изложенного в данном обзоре подхода к описанию энергетического спектра и термодинамического потенциала неупорядоченных систем для исследования магнитных свойств сплавов переходных металлов.

Таким образом, установлен микроскопический механизм магнитных фазовых превращений в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, связанный с положением уровня Ферми относительно кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов и перестройкой при повышении температуры самого спектра электронов, приводящей к уменьшению локализованных магнитных моментов и равновесных значений параметра корреляций в их ориентации.

Используя рассчитанные равновесные значения параметров пар-

ных магнитных корреляций ($T = 0$ К), при помощи формул (67), (73) в работе [54] были оценены размеры «магнитных доменов» в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ в зависимости от величины напряженности магнитного поля H_z . (рис. 17, а). В области магнитных полей $H_z < 4000$ А/м наблюдается линейный рост размеров «магнитных доменов», ориентированных вдоль внешнего магнитного поля. При этом размеры «доменов», ориентированных против поля, слабо уменьшаются. Как видно из сопоставления рис. 17, а и 17, б, размер «магнитных доменов», ориентированных вдоль поля, пропорционален концентрации x_{μ^+} , т.е. увеличение размера этих «доменов» происходит за счет «доменов», имеющих противоположную ориентацию. При больших значениях напряженности магнитного поля рост размеров «магнитных доменов», направленных вдоль поля, замедляется, а размеры «доменов», ориентированных против поля, быстро уменьшаются. В этой области происходит переориентация магнитных моментов, направленных против магнитного поля, что приводит к увеличению числа «магнитных доменов» вдоль поля (без изменения их размеров). Полученные результаты хорошо согласуются с известными закономерностями изменения размеров магнитных доменов при изменении напряженности внешнего магнитного поля. Размер «магнитного домена» при $H_z = 0$, оцененный по параметрам парных магнитных корреляций, близок к экспериментально определенному среднему размеру области однородности в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ [45].

Общепризнанным считается, что уникальные магнитные свойства сплава Fe–Co проявляются благодаря установлению в нем дальнего атомного порядка. Однако, как показано в работе [45], струк-

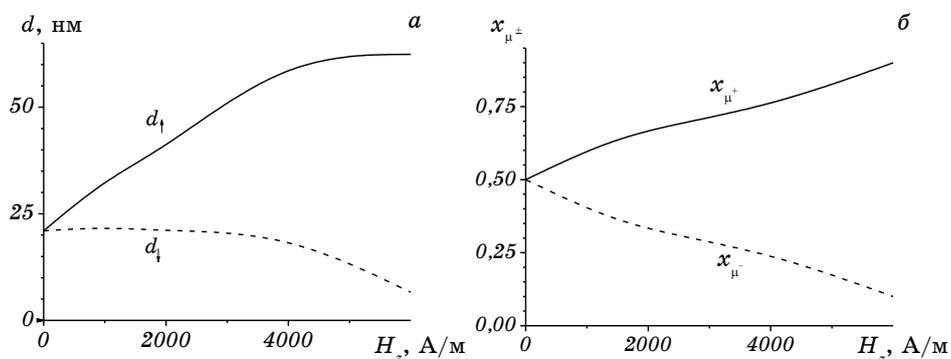


Рис. 17. Зависимости линейных размеров (d_{\uparrow} и d_{\downarrow}) «магнитных доменов» (а) и равновесных значений концентраций (x_{μ^+} и x_{μ^-}) локализованных магнитных моментов (б), ориентированных вдоль и против внешнего магнитного поля от величины напряженности этого поля.

турное состояние сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, которое можно изменять термообработкой благодаря наличию на фазовой диаграмме системы области высокотемпературного расслоения, слабо влияет на его магнитные характеристики. Кроме того, установлено, что упорядочение по типу дальнего порядка происходит не более чем в 10% объема сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, а остальной объем упорядочивается по типу ближнего порядка.

Равновесному состоянию при $H_z = 0$ соответствуют значения параметров $\varepsilon^m = 0,24$ и $\varepsilon^a = -0,25$, определяющие ферромагнитное состояние с максимальным ближним атомным порядком. Найдены также равновесные значения параметра парных магнитных корреляций для ряда неравновесных значений параметра атомного упорядочения, моделирующих различные термические обработки сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ (рис. 18). Как показывают расчеты, при переходе от области антиферромагнитного упорядочения к ферромагнитной области на магнитной фазовой диаграмме параметр корреляции ε^m изменяется не скачком, а непрерывно. Это определяет возможность в различных системах для параметра ε^m принимать значения, отличающиеся от максимально возможных.

Как видно из представленных на рис. 18 результатов, изменение параметра ε^a (при $\eta_a = 0$) от значения $-0,25$, соответствующего максимальному ближнему порядку, до значения $0,25$, соответствующего полному атомному расслоению, слабо влияет на величину равновесного параметра магнитных корреляций ε^m . Таким образом, приведенные первопринципные расчеты подтверждают выводы работы [45]. Кроме того, на рис. 18 точкой представлено равновесное значение параметра парных магнитных корреляций для системы с дальним атомным порядком, $\eta_a = 0,9$ ($\varepsilon^a = 0$). Как видно, установление дальнего атомного порядка привело бы к подавлению магнитных корреляций в сплаве $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$. Это говорит о конкурен-

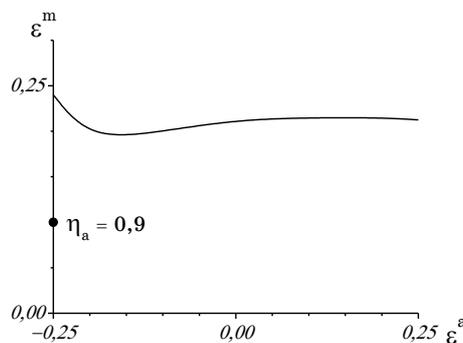


Рис. 18. Зависимость равновесных значений параметра парных магнитных корреляций ε^m от величины параметра атомного ближнего порядка ε^a .

ции в данном сплаве магнитного и атомного упорядочений, что согласуется с предсказанными в работе [55] эффектами взаимного влияния атомного и магнитного порядков в бинарных сплавах. При этом свободная энергия состояния с дальним атомным порядком всего на 0,6% превосходит энергию состояния с максимальным ближним порядком, в то время как свободные энергии состояний с $\eta_a = 0$, отличаются от свободной энергии равновесного состояния более чем на 8%. Это можно рассматривать как проявление тенденции к сосуществованию в системе $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ областей, упорядоченных по типу ближнего и дальнего порядка [45].

12. СПИН-ЗАВИСИМЫЙ ТРАНСПОРТ

Для описания электропроводности системы во внешнем магнитном поле добавим в гамильтониане (1) слагаемое

$$H' = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} 2\mu_B s_1 H \delta_{s_1 s_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (74)$$

где μ_B , H , s — магнетон Бора, напряженность внешнего магнитного поля и проекция спина электрона на направление магнитного поля соответственно; индекс состояния γ включает индекс проекции спина электрона s на ось z .

На рисунке 19 показаны плотности электронных состояний, рассчитанные по формуле (26) для сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$, который находится в магнитном поле: а) $H = 0$ А/м, б) $H = 5000$ А/м. Расчет проведен для температуры $T = 0$ К. При этой температуре сплав находится в ферромагнитной фазе. Для упрощения расчетов параметр дальнего порядка в этом случае полагался равным $\eta_a = 0$, а параметры парных межатомных корреляций на первых двух координационных

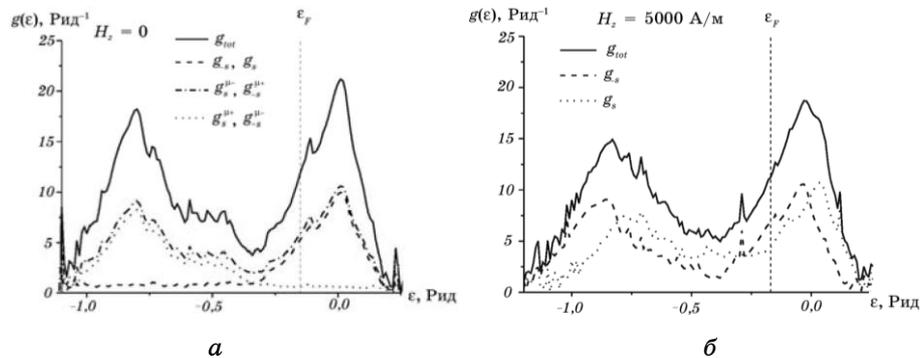


Рис. 19. Плотности электронных состояний сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$ при напряженности магнитного поля H : а) $H_z = 0$ А/м, б) $H_z = 5000$ А/м.

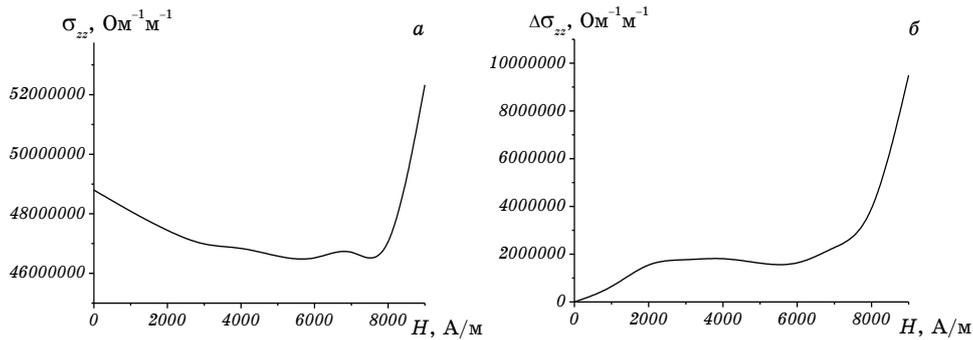


Рис. 20. Зависимости электропроводности и эффекта спинового транспорта сплава $Fe_{0,5}Co_{0,5}$ от величины внешнего магнитного поля.

сферах определялись из условия минимума свободной энергии F (52). Значение параметров межатомных корреляций на первых двух координационных сферах при $T = 0$ К, $H = 0$ А/м равняются соответственно $\epsilon_1^a = \epsilon_{01,02} = 0,25$, $\epsilon_2^a = \epsilon_{01,11} = 0,25$.

Зависимость статической проводимости сплава от внешнего магнитного поля, рассчитанная по формуле (70), показана на рис. 20, а [56]. На рисунке 20, б представлена разность вкладов в электропроводность $\Delta\sigma_{zz} = \sigma_{zz-s} - \sigma_{zzs}$ электронов, спины которых направлены против и вдоль внешнего магнитного поля.

Из рисунка 20, б видно, что при увеличении напряженности магнитного поля величина $\Delta\sigma_{zz}$, характеризующая спин-зависимый транспорт, немонотонно возрастает. Это обусловлено зеемановским сдвигом энергетических зон для электронов с разными проекциями спина на направление внешнего магнитного поля, а также ориентацией локализованных магнитных моментов. При расчетах электропроводности последним интегралом в выражении (70) пренебрегалось. Расчет проведен для $T = 0$ К.

С целью объяснения полученных результатов на рисунках 21, 22 приведена зависимость параметров магнитного порядка от внешнего магнитного поля. На рисунке 21 изображена зависимость концентрации узлов x_{μ^i} с проекцией локализованного магнитного момента, направленного вдоль внешнего магнитного поля, от величины поля [54].

На рисунке 22 представлена зависимость параметров корреляции $R_{ij}^{\lambda_j m_{\lambda_j} / \lambda_i m_{\lambda_i}}$ в ориентации локализованных магнитных моментов на соседних узлах решетки от внешнего магнитного поля. Параметр дальнего магнитного порядка $\eta_m = 0$.

Как видно из рис. 21, 22, с увеличением магнитного поля H степень магнитного порядка уменьшается, что проявляется на рис. 20 в

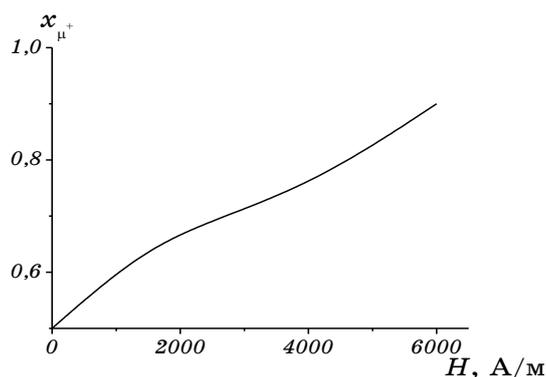


Рис. 21. Зависимость концентрации узлов с проекцией локализованного магнитного момента, направленного вдоль внешнего магнитного поля, от величины поля H для сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$.

уменьшении электропроводности сплава. При последующем повышении напряженности магнитного поля до $H = 8000$ А/м степень магнитного порядка увеличивается благодаря увеличению относительного числа «магнитных доменов» с магнитными моментами, ориентированными вдоль поля (рис. 21), а также увеличению размеров этих областей (рис. 22). В связи с этим при возрастании поля в области выше 8000 А/м электропроводность сплава увеличивается.

Из полученных результатов следует, что основной вклад в электропроводность дают электроны, спины которых направлены против магнитного поля. Это вызвано тем, что во внешнем магнитном поле собственные магнитные моменты электронов сориентированы

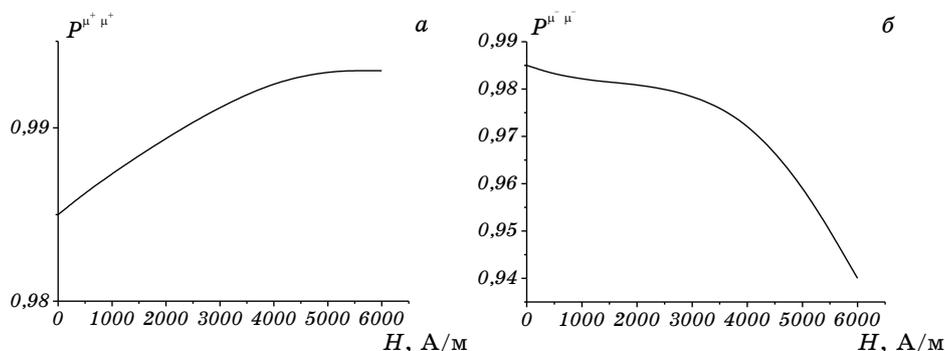


Рис. 22. Зависимости параметров корреляции $P_{ij}^{\lambda_i m_{ij} / \lambda_i m_{ij}}$ в ориентации локализованных магнитных моментов на соседних узлах решетки от внешнего магнитного поля H для сплава $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}$: а) магнитные моменты направлены вдоль поля, б) магнитные моменты направлены против поля.

преимущественно вдоль поля.

Величина спиновой поляризации электронов определяется величиной кулоновской квазищели в энергетическом спектре электронов, обусловленной сильными электронными корреляциями, а также значением напряженности внешнего магнитного поля.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта УНТЦ № 4919.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, and P. L. Leath, *Rev. Mod. Phys.*, **46**, No. 3: 465 (1974).
2. A. Mookerjee, *J. Phys. C*, **6**, No. 10: L205 (1973).
3. S. S. Razee, A. Mookerjee, and R. Prasad, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, No. 19: 3301 (1991).
4. S. S. Razee, S. S. Rajput, R. Prasad et al., *Phys. Rev. B*, **42**, No. 15: 9391 (1990).
5. R. Mills and P. Ratanavararaksa, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 10: 5291 (1978).
6. H. W. Diehl and P. L. Leath, *Phys. Rev. B*, **19**, No. 2: 587 (1979).
7. T. Kaplan and L. J. Gray, *Phys. Rev. B*, **15**, No. 6: 3260 (1977).
8. L. J. Gray and T. Kaplan, *Phys. Rev. B*, **24**, No. 4: 1872 (1981).
9. V. Kumar, A. Mookerjee, and V. K. Srivastava, *J. Phys. C*, **15**, No. 9: 1939 (1982).
10. М. П. Фатеев, *ТМФ*, **90**, № 1: 128 (1992).
11. F. Ducastelle and F. Gautier, *J. Phys. F*, **6**, No. 11: 2039 (1976).
12. G. Treglia, F. Ducastelle, and F. Gautier, *J. Phys. F*, **8**, No. 7: 1437 (1978).
13. F. Gautier, F. Ducastelle, and J. Giner, *Phil. Mag.*, **31**, No. 6: 1373 (1975).
14. F. Ducastelle and G. Treglia, *J. Phys. F*, **10**, No. 10: 2137 (1980).
15. A. Bieber and F. Gautier, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**, No. 6: 2061 (1984).
16. A. Bieber and F. Gautier, *Solid State Commun.*, **38**, No. 12: 1219 (1981).
17. F. Ducastelle, *J. Phys. C*, **7**, No. 10: 1795 (1974).
18. V. F. Los' and S. P. Repetsky, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**: 1707 (1994).
19. S. P. Repetsky, Ye. G. Len, and N. V. Chubinsky, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 867 (1999).
20. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, *ФТТ*, **36**, № 1: 94 (1994).
21. F. Sacchetti, *Solid State Commun.*, **30**: 795 (1979).
22. F. Sacchetti, *J. Phys. F*, **10**: 801 (1980).
23. V. Christoph and A. L. Kuzemskii, *Physica Status Solidi (b)*, **120**: K219 (1983).
24. Ю. Ю. Циовкин, А. Н. Волошинский, *ФММ*, **75**, № 3: 25 (1993).
25. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатный, *ТМФ*, **131**, № 3: 456 (2002).
26. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатный, *ФММ*, **96**, № 1: 18 (2003).
27. R. Flederling, M. Kelm, G. Reuseher et al., *Nature*, **402**, No. 6763: 787 (1999).
28. G. A. Prinz, *Physics Today*, **48**, No. 58: 5863 (1995).
29. С. Борухович, *УФН*, **169**, № 7: 737 (1999).

30. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Москва: Физматгиз: 1962).
31. H. Böttger, *Principles of the Theory of Lattice Dynamics* (Berlin: Akademisch-Verlag: 1983); X. Бётгер, *Принципы динамической теории решетки* (Москва: Мир: 1986).
32. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1983).
33. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (Москва: Наука: 1971).
34. И. З. Фишер, *Статистическая теория жидкостей* (Москва: Физматгиз: 1961).
35. J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94**, No. 6: 1498 (1954).
36. R. R. Sharma, *Phys. Rev. B*, **19**, No. 6: 2813 (1979).
37. P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18**, No. 3: 365 (1950).
38. S. P. Repetsky, V. S. Staschuk, R. O. Yaremko et al., *Functional Materials*, **10**, No. 3: 490 (2003).
39. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем. Электронные свойства сплавов* (Киев: Наукова думка: 1995).
40. С. П. Репецкий, В. А. Татаренко, И. Г. Вышиванная и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 6: 787 (2007).
41. P. L. Rossiter, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **11**, No. 3: 615 (1981).
42. Р. Бозорт, *Ферромагнетизм* (Москва: Изд. иностр. лит.: 1956).
43. А. Е. Вол, *Строение и свойства двойных металлических систем* (Москва: Физматгиз: 1962), т. 2.
44. E. E. Schumacher, *J. Inst. Metals*, **78**, No. 1: 1 (1950).
45. Ю. И. Устиновщиков, Б. Е. Пушкарев, И. Н. Шабанова и др., *Металлы*, № 5: 33 (2003).
46. *Диаграммы состояния двойных металлических систем* (ред. Н. П. Лякишев) (Москва: Машиностроение: 1997), т. 2.
47. S. P. Repetskii and I. G. Vyshivanaya, *Phys. Met. Metallogr.*, **99**, No. 6: 558 (2005).
48. А. А. Смирнов, *Теория электросопротивления сплавов* (Киев: Изд. АН УССР: 1960).
49. С. П. Репецкий, В. А. Татаренко, И. Н. Мельник и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 5: 605 (2008).
50. С. П. Репецкий, В. А. Татаренко, И. Н. Мельник и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 6: 771 (2008).
51. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 11: 1475 (2006).
52. F. Schreiber and Z. Frait, *Phys. Rev. B*, **54**, No. 9: 6473 (1996).
53. J. M. MacLaren, T. C. Schulthess, W. H. Butler et al., *J. Appl. Phys.*, **85**, No. 8: 4833 (1999).
54. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 11: 1471 (2006).
55. А. А. Смирнов, *Обобщенная теория упорядочения сплавов* (Киев: Наукова думка: 1986).
56. С. П. Репецкий, Е. Г. Лень, В. В. Лизунов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 989 (2006).