

УДК 538.114

© 1992

ОТНОШЕНИЕ Δ_0/T_c В КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ МАГНЕТИКАХ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЭФФЕКТИВНОГО ПОЛЯ

Е. В. Розенфельд, А. А. Сивенцев

Рассмотрены величины Δ_0/T_c и форма зависимости $\Delta(T)$ в теориях сверхпроводимости БКШ и ферромагнетизма Стонера при учете зависимости интеграла обменного взаимодействия V от волнового вектора q . В отличие от теории БКШ, где Δ_0/T_c и $\Delta(T)$ не зависят от плотности состояний $g(\epsilon)$, в теории Стонера эти величины определяются в основном формой $g(\epsilon)$, причем Δ_0/T_c лежит в пределах $-\pi/\sqrt{3}, 2\pi$, где $\Delta(T) = (1 - T^2/T_c^2)^{1/2}$. Этот результат почти не меняется при учете модельной зависимости $V(q)$, однако при этом происходит эффективное искажение функции распределения электронов, в частности сужение («охлаждение») ступеньки Ферми.

Целью данной работы является исследование величины Δ_0/T_c в зонных магнетиках. Такая постановка задачи вполне естественна при учете известной аналогии между теориями магнетизма и сверхпроводимости и достаточно важной роли, которую в последней играет подобное отношение $2\Delta_0/T_c$. Тем не менее, насколько нам известно, вопрос этот до сих пор не обсуждался.¹ Наибольший интерес здесь, на наш взгляд, представляют исследование факторов, могущих повлиять на величину рассматриваемого отношения, и диапазон его изменения в рамках той или иной модели. Именно этим вопросам уделено основное внимание в работе.

1. Общие уравнения

В простейшем приближении при описании магнетизма коллективизированных электронов учитывается лишь обменная часть полного оператора электронного взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{1}{N_0} \sum_{kq\sigma\sigma'} V_q c_k^+ + q\sigma c_{k\sigma} c_p^+ - q\sigma' c_{p\sigma'} \Rightarrow \frac{1}{N_0} \sum_{kq\sigma} \hat{V}_q \hat{n}_{k+q\sigma} (1 - \hat{n}_{k\sigma}) \quad (1)$$

и полученный оператор сводится к одночастичному в приближении среднего поля

$$\hat{V} \approx \frac{N_e}{N_0} \sum_q V_q - \frac{1}{N_0} \sum_{k\sigma} \left[\sum_q (\hat{V}_q + \hat{V}_{-q}) \langle n_{k+q\sigma} \rangle \right] n_{k\sigma} + \frac{1}{N_0} \sum_{kq\sigma} \hat{V}_q \langle n_{k+q\sigma} \rangle \langle n_{k\sigma} \rangle. \quad (2)$$

Здесь V_q — матричный элемент электрон-электронного взаимодействия; N_0 — число узлов в кристалле; N_e — полное число электронов; ... обозначает кванто-

¹ Исключение составляют упоминание о величине Δ_0/T_c в Fe, Co и Ni в работе Вольфарта [1], а также наша работа [2].

востатистическое усреднение с полным гамильтонианом задачи, который с учетом сделанных приближений принимает вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}\sigma}) n_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} w_{\mathbf{k}\sigma} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle,$$

$$w_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2}{N_0} \sum_q V_q \langle n_{\mathbf{k}+q\sigma} \rangle. \quad (3)$$

В (3) опущена константа, пропорциональная N_e , и V_q считается действительным. Входящие в гамильтониан средние должны самосогласованно определяться из уравнений

$$\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}\sigma} - \zeta), \quad f(x) = (1 + \exp(x/T))^{-1}, \quad \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = N_e \quad (4)$$

вместе с химпотенциалом ζ .

Из (3) вполне очевидно, что в общем случае $w_{\mathbf{k}}^\sigma \neq \text{const}$ и полная одночастичная энергия

$$E_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}\sigma} \quad (5)$$

отличается от $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ не просто сдвигом. В результате будут различаться по формуле также плотности состояний исходного спектра невзаимодействующих электронов $g(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ и спектра (5) с учетом взаимодействия $G_\sigma(E_{\mathbf{k}\sigma})$. Переход к спектру (5) и плотности состояний G_σ в силу одночастичного приближения (2) дает стандартную фермиевскую функцию распределения для электронов $f(E_{\mathbf{k}\sigma} - \zeta)$. С другой стороны, характеризуя \mathbf{k} -состояния затравочной энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и используя соответственно плотность состояний g , мы получим функцию распределения $n_\sigma(\varepsilon)$, которая уже не является фермиевской. Два этих способа описания системы взаимодействующих частиц в одночастичном приближении совершенно эквивалентны, и выбор того или другого диктуется удобством решения уравнений самосогласования (4). При этом в первом случае центр ступеньки функции распределения (значение $n = 1/2$) в каждой спиновой подполосе попадает в состояния с полными энергиями $E_{\mathbf{k}\sigma} = \xi$.

Второй способ оказывается значительно удобнее в случае, когда зависимость от \mathbf{k} входит в $w_{\mathbf{k}\sigma}$ только через $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ (в частности, это имеет место, когда $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и V_q обладают центральной симметрией). Обозначив в этом случае кинетическую энергию электронов в центре ступеньки E_σ , немедленно получаем уравнение

$$E_\sigma - \zeta = w_\sigma(E_\sigma). \quad (6)$$

Если определить расщепление подполос Δ как разность кинетических энергий электронов в центрах ступенек, (6) можно переписать в виде

$$\Delta \equiv E_+ - E_- = w_+(E_+) - w_-(E_-), \quad \Delta_0 = \Delta(T = 0). \quad (7)$$

Поскольку в силу (3) зависимость $w_\sigma(\varepsilon)$ определяется только видом функции распределения электронов в полосе со спином s , для существования ферромагнетизма необходимо, чтобы уравнение (6) при данном ξ имело как минимум два различных самосогласованных решения. Если решений больше (скажем,

m штук), то возможно m парамагнитных и $m(m-1)$ ферромагнитных решений, и реализуется то из них, которое соответствует минимуму свободной энергии системы

$$F = -T \ln \left(Tr \left\{ \exp \left[- \frac{\hat{H} - \xi N}{T} \right] \right\} \right) = \\ = -T \sum_{\mathbf{k}\sigma} \ln \left(1 + \exp \left\{ \frac{\xi - \varepsilon_{\mathbf{k}} + w_{\mathbf{k}\sigma}}{T} \right\} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} w_{\mathbf{k}\sigma} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (8)$$

Пытаясь выяснить какие-то общие закономерности, которым и подчиняется поведение электронного газа в приближениях (1), (2), мы, естественно, должны ввести достаточно грубые приближения, без которых анализ полученных уравнений в общем виде вряд ли возможен.

2. Теория Стонера

Наиболее радикально упрощает ситуацию предположение, что электрон-электронное взаимодействие является точечным, т. е.

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad V_{\mathbf{q}} = V = \text{const}. \quad (9)$$

$$w_{\mathbf{k}\sigma} = w_{\sigma} = 2VN_{\sigma}/N_0 = V/N_0(N_{\sigma} + \sigma M), \quad \sigma = \pm 1,$$

$$N_{\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad M = N_{+} - N_{-}. \quad (10)$$

В этом приближении, следовательно, обменная энергия для всех электронов с одной проекцией спина одинакова и пропорциональна их общему числу N_{σ} . Поэтому два способа описания, обсуждавшиеся в предыдущем разделе, отличаются лишь тем, что в первом случае на величину

$$\Delta = 2Vm \quad (11)$$

оказываются раздвинуты плотности состояний G_{σ} в подполосах, а центры ступенек совпадают между собой и с химпотенциалом, а во втором случае плотности состояний в подполосах одинаковы ($g(\varepsilon)$), а раздвинуты центры ступенек $E_{\sigma} = \xi + \sigma Vm$. При этом полная система уравнений модели Стонера принимает вид

$$n_{\sigma}(\varepsilon) = f(\varepsilon - \sigma\Delta/2 - \xi),$$

$$\Delta = 2V \int d\varepsilon g(\varepsilon) [n_{+}(\varepsilon) - n_{-}(\varepsilon)] = 2Vm,$$

$$m = M/N_0, \quad n = N_{\sigma}/N_0 = \int d\varepsilon g(\varepsilon) \sum_{\sigma} n_{\sigma}(\varepsilon),$$

$$\frac{1}{N_0} F = -T \int d\varepsilon g(\varepsilon) \sum_{\sigma} \ln \left(1 + \exp \left\{ \frac{\xi - \varepsilon + \sigma\Delta/2}{T} \right\} \right) + \frac{\Delta^2}{4V}. \quad (12)$$

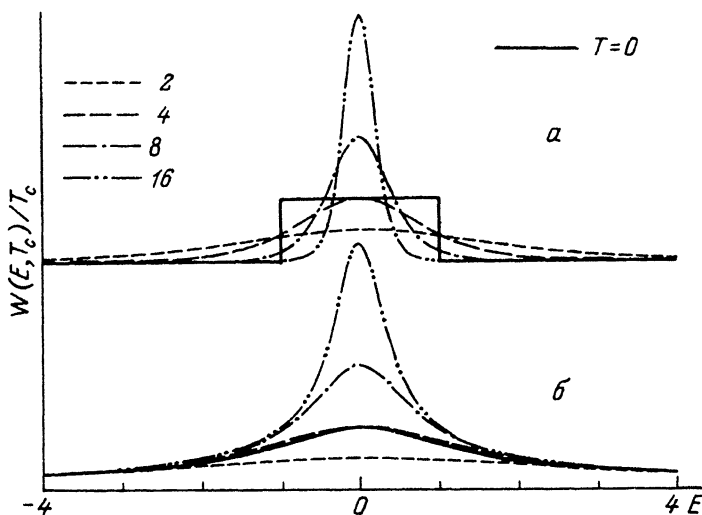


Рис. 1. Форма весовой функции $W(E, T)$: *a* — для ферромагнетика (формула (13)) при $T=0$ и при $T=T_c$ для отношений Δ_0/T_c , равных 2, 4, 8 и 16 (энергия в единицах $\Delta_0/2$); *b* — для сверхпроводника (формула (21)) при $T=0$ и при $T=T_c$ для отношений $2\Delta_0/T_c$, равных 2, 4, 8 и 16 (энергия в единицах Δ_0).

Единственным параметром, требующим самосогласования, теперь оказывается Δ (или, что то же самое, m), и условие самосогласования (второе уравнение (10)) совпадает с условием минимума F по этому параметру $dF/d\Delta = 0$. Удобно представить это условие в виде

$$2V \int d\epsilon g(\epsilon) W(\epsilon, T) = 1,$$

$$W(\epsilon, T) = \frac{n_+(\epsilon) - n_-(\epsilon)}{\Delta}. \quad (13)$$

Весовая функция $W(\epsilon, T)$ в силу (11) оказывается нормированной на единицу во всей ферромагнитной области, т. е. $\int d\epsilon W(\epsilon, T) = 1$ при любых T и Δ . Ее зависимость от энергии при $T=0$ и при $T=T_c$ для различных значений отношения Δ_0/T_c изображена на рис. 1, *a*. Если расщепление подполос Δ плавно падает от Δ_0 при $T=0$ до 0 при $T=T_c$, то ширина и форма кривой W наиболее слабо меняются во всей ферромагнитной области при $\Delta_0/T_c \approx 4$. Поскольку условие самосогласования (13) требует постоянства интеграла от $g(\epsilon)$ с весом W , ясно, что при гладкой плотности состояний отношение Δ_0/T_c в модели Стонера будет близко к 4. Действительно, полагая

$$g(\epsilon) \approx g + g'(\epsilon - \epsilon_F) + 1/2g''(\epsilon - \epsilon_F)^2, \quad (14)$$

нетрудно получить (подробнее см. [2])

$$\frac{\Delta_0}{T_c} \approx 2\pi \sqrt{\frac{(g')^2 - gg''}{3(g')^2 - gg''}}. \quad (15)$$

Поскольку в случае (14) ферромагнетизм устойчив лишь при $g'' < 0$, получаем, что отношение Δ_0/T_c лежит в довольно узких пределах

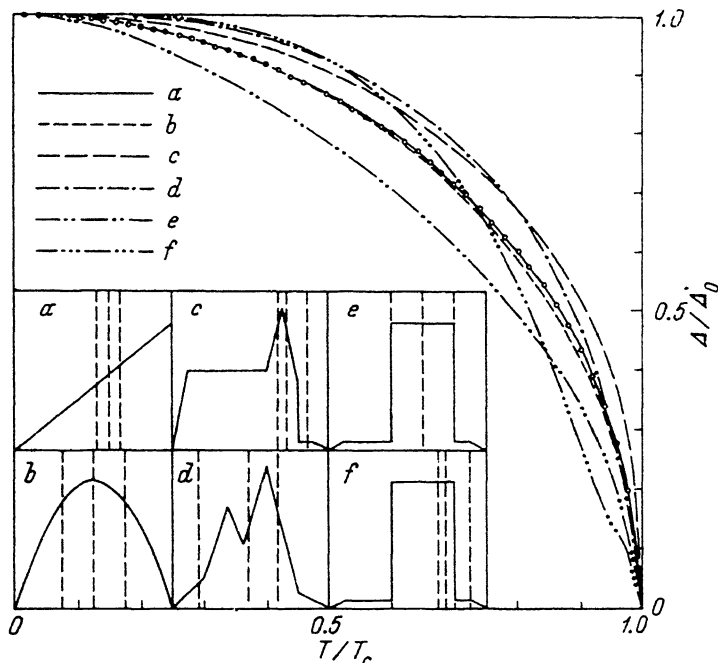


Рис. 2. Форма зависимости $\Delta(T)$ для различных функций $g(\epsilon)$, изображенных на вставке.

Вертикальными штриховыми линиями показаны положения парамагнитного и ферромагнитных для спинов «вверх» и «вниз» хипотенциалов. Точками изображена функция $(1 - (T/T_c)^2)^{1/2}$. Соответствующие отношения $\Delta_0/T_c = 3.52$ (a), 6.28 (b), 3.57 (c), 6.25 (d), 8.2 (e), 2.56 (f). Случаи e и f приведены в качестве примеров выхода за рамки (16).

$$3.62 \approx 2\pi/\sqrt{3} \leq \Delta_0/T_c \leq 2\pi \approx 6.28. \quad (16)$$

Левая граница здесь соответствует простому линейному склону с $g' < 0$ (отличие от 4 связано со сдвигом хипотенциала при росте температуры), правая — симметричному параболическому пику с $g' = 0$.

Ограничение (16) в модели Стонера оказывается довольно общим. Из рис. 1, a нетрудно понять, что величина Δ_0/T_c может оказаться существенно больше 4 только в случае, когда уровень Ферми лежит на очень плоской вершине симметричного пика $g(\epsilon)$, и существенно меньше, когда он находится в яме на вершине пика. Следовательно, выход величины отношения Δ_0/T_c за рамки (16) возможен только в довольно экзотических случаях. Этот вывод подтверждается прямыми расчетами зависимостей $\Delta(T)$ для некоторых видов плотностей состояний, результаты которых приведены на рис. 2.

Относительно небольшие изменения и величины отношения Δ_0/T_c , и самого вида зависимости $\Delta(T)$ для весьма различных $g(\epsilon)$ связаны с очень простым обстоятельством. Как ясно из (6), (10), температурная зависимость Δ в модели Стонера определяется даже не просто видом $g(\epsilon)$, что было бы естественно в рамках обменного приближения, при котором равновесное значение Δ устанавливается в результате конкуренции между выигрышем в обменной и проигрышем в кинетической (зонной) энергии. Из (6) и (10) ясно, что положение центров ступенек в подполосах определяется интегральной плотностью состояний $N(\epsilon)$, которая является неубывающей функцией, слабо чувствительной к структуре $g(\epsilon)$.

$$E_0 - \xi = 2V\mathcal{N}(E_0, T),$$

$$\mathcal{N}(E, T) = \int d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon - E) = \int d\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) [-\partial/\partial\epsilon f(\epsilon - E)]. \quad (17)$$

Таким образом, решение уравнений (12) сводится к нахождению точек пересечения прямой $E - \xi$ и кривой $2V\mathcal{N}(E, T)$, причем ξ подбирается так, чтобы ординаты этих точек были симметричны относительно $n/2$. С ростом температуры кривизна $\mathcal{N}(E, T)$ падает и точки пересечения сближаются, сливаясь при $T = T_c$ в одно парамагнитное решение.

И зависимость $\Delta(T)$ только от интегральной плоскости состояний, и постоянство нормировки весовой функции W в (13) связаны с основным приближением модели Стонера — приближением постоянного матричного элемента (9). Именно это приближение делает обменную энергию w_0 не зависящей от кинетической ϵ , что приводит к ее зависимости только от числа частиц в подполосе или, что то же, от интегральной плотности состояний.

Совершенно иначе обстоит дело в теории сверхпроводимости, где в рамках модели БКШ ширина сверхпроводящей щели $2\Delta_s$ пропорциональна среднему значению амплитуды вероятности рождения (уничтожения) куперовской пары

$$\Delta_s = \frac{V_s}{N_0} \sum_k \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle. \quad (18)$$

Это приближение, как и (2), является приближением эффективного поля, и в нем, как и в (9), предполагается постоянство матричного элемента. Однако получающийся в приближении (18) гамильтониан в отличие от (3) не является диагональным. Его диагонализация ($u-v$ -преобразование) приводит к тому, что разность энергий между скоррелированным и нескоррелированным заполнением одночастичных состояний k , $-k$ быстро падает по мере удаления k от уровня Ферми²

$$\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_s^2} - \epsilon_k \approx \Delta_s^2 / (2\epsilon_k). \quad (19)$$

В результате существование куперовских пар оказывается энергетически выгодным только в непосредственной окрестности уровня Ферми и число их существенно нелинейно связано с Δ_s . Подчеркнем, что такая зависимость корреляционной энергии от кинетической в БКШ возникает только из-за дополнительной диагонализации полученного в приближении молекулярного поля гамильтониана, в то время как в магнитных системах такая зависимость может возникнуть только когда $V_q \neq \text{const}$.

Еще одним существенным моментом является то, что распад куперовской пары, вообще говоря, не сопровождается ростом кинетической энергии. В результате зависимость $g(\epsilon)$ уже не должна оказывать сколько-нибудь заметного влияния на зависимость $\Delta_s(T)$. На первый план при определении вклада данной пары $k, -k$ одночастичных состояний в Δ_s выходит соотношение между корреляционной энергией (19) и температурой, а зависимость корреляционной энергии от кинетической ϵ_k однозначно задается приближением эффективного поля. С математической точки зрения это означает, что, переписав стандартное уравнение для сверхпроводящей щели

² В (19) — (21) отсчет энергии ϵ_k идет от уровня Ферми.

$$\Delta_s = \frac{V_s}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_s}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2}} \operatorname{th} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_s^2}}{2T} \right) \quad (20)$$

по аналогии с (13) в виде

$$\frac{1}{2} V_s \int d\varepsilon g(\varepsilon) W_s(\varepsilon, T) = 1,$$

$$W_s(\varepsilon, T) = \frac{\operatorname{th} \left(\frac{\sqrt{(\varepsilon - \xi)^2 + \Delta_s^2}}{2T} \right)}{\sqrt{(\varepsilon - \xi)^2 + \Delta_s^2}}, \quad (21)$$

мы получаем для весовой функции W_s интеграл нормировки, меняющийся с изменением Δ_s и T . На рис. 1, б изображена зависимость $W_s(\varepsilon)$ при $T=0$ и при $T=T_c$ для различных значений $2\Delta_s(0)/T_c$. Ясно, что зависимость интеграла нормировки от T и Δ_s однозначно определяется приближением эффективного поля (18). Из-за условия самосогласования (21) это несохранение нормировки W_s становится принципиально важным, и именно оно определяет зависимость $\Delta_s(T)$. При этом влияние формы $g(\varepsilon)$ на зависимость $\Delta_s(T)$ оказывается весьма незначительным, а отношение $2\Delta_s(0)/T_c$ слабо отличается от значения 3.52, соответствующего случаю $g(\varepsilon) = \operatorname{const}$. Существенное отличие экспериментальной величины отношения $2\Delta_s(0)/T_c$ от этого значения указывает на неприменимость модели БКШ, т. е. на отличную от (19) связь между корреляционной и кинетической энергиями.

Аналогично соответствие экспериментального значения отношения Δ_0/T_c формуле (16) можно, видимо, рассматривать как критерий применимости модели Стонера при описании конкретного коллективизированного магнетика. Например, для Fe, Co и Ni соответственно $\Delta_0/T_c \approx 15, 9$ и 6 [1, 2], так что из них только никель можно по данному критерию считать стонеровским магнетиком. Встает, однако, вопрос: с каким из двух основных приближений — эффективного поля (1), (2) или постоянного матричного элемента (6) — главным образом связан этот критерий?

3. Конечный радиус взаимодействия в \mathbf{k} -пространстве

Несколько более реалистичным, чем (9), и все еще достаточно простым является приближение

$$V_{\mathbf{q}} = V\theta(q_0 - |\mathbf{q}|), \quad (22)$$

где q_0 — параметр, определяющий радиус взаимодействия в \mathbf{k} -пространстве, т. е. число состояний, с которыми взаимодействует каждое данное \mathbf{k} -состояние

$$\nu = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}/V = \frac{4\pi q_0^3}{3(2\pi)^3 N_0}. \quad (23)$$

Использование приближения (22) в теории эффективного поля (3) связано с интегрированием по зоне Бриллюэна, что нереально в аналитическом виде. Поэтому, сохраняя дух приближения (22), мы сделаем еще одно упрощение, предположив, что каждое \mathbf{k} -состояние взаимодействует с тем же числом νN_0

состояний, но только с близкими кинетическими энергиями, а не волновыми векторами

$$V_q = V\theta (\delta - |\varepsilon_{\mathbf{k}+q} - \varepsilon_{\mathbf{k}}|),$$

$$\nu = \frac{\int_{-\infty}^{\varepsilon + \delta(\varepsilon)} d\varepsilon' g(\varepsilon')}{\int_{-\infty}^{\varepsilon - \delta(\varepsilon)} d\varepsilon' g(\varepsilon')} = \text{const.} \quad (24)$$

Недостатки этого приближения очевидны, но они частично компенсируются простотой получающихся при этом из (3) уравнений

$$\begin{cases} w_\sigma(\varepsilon) = 2V \int_{\varepsilon - \delta(\varepsilon)}^{\varepsilon + \delta(\varepsilon)} d\varepsilon' g(\varepsilon') n_\sigma(\varepsilon'), \\ n_\sigma(\varepsilon) = f(\varepsilon - \zeta - w_\sigma(\varepsilon)). \end{cases} \quad (25)$$

Наиболее существенным отличием этих уравнений от уравнений модели Стонера является зависимость обменной энергии $-w$ от кинетической ε . Для глуболежащих электронов обменная энергия достигает наименьшего значения $-2V\nu$ (все состояния с близкими энергиями заняты), а в слое шириной $\approx 2\delta$ вокруг химпотенциала происходит увеличение этой энергии до нуля. При переходе от $g(\varepsilon)$ к $G_\sigma(\varepsilon)$ поэтому область энергий $\varepsilon > E_\sigma + \delta$ остается без изменений, область $\varepsilon \leq E_\sigma - \delta$ сдвигается вниз на $2V\nu$ без изменения формы, а в слое $E_\sigma - \delta \leq \varepsilon \leq E_\sigma + \delta$ происходит уменьшение плотности состояний, компенсирующее это растяжение. Функция распределения $n\sigma(\varepsilon)$ становится нефермиевской и, более того, в общем случае исчезает даже ее симметрия относительно центра ступеньки, т. е. $n_\sigma(E_\sigma + \varepsilon) \neq 1 - n_\sigma(E_\sigma - \varepsilon)$. Однако, как показывают прямые расчеты, в случае $\delta \gg T$ эти эффекты становятся не слишком существенными и с хорошей точностью

$$n_\sigma(\varepsilon) \approx \left(1 + \exp \left[\frac{\varepsilon - E_\sigma}{T} \right] \right)^{-1},$$

$$T^* = T \left(1 + \frac{V}{\delta(E_\sigma)} \text{th} \left[\frac{\delta(E_\sigma)}{T} \right] \right)^{-1}. \quad (26)$$

Таким образом, учет конечности радиуса взаимодействия в \mathbf{k} -пространстве приводит к снижению эффективной температуры ступеньки Ферми или, другими словами, к уменьшению числа состояний с вероятностями заполнения, отличными от 0 и 1. Такой вывод не оставляет возможности объяснения ферромагнетизма, скажем, железа в модели эффективного поля, так как основные трудности модели Стонера — слишком высокая предсказываемая T_c и слишком малый парамагнитный момент — связаны с недостаточной шириной ступеньки функции распределения. Поэтому стоит еще раз подчеркнуть, что переход от (22) к (24) является грубым приближением, заменяющим интегрирование по сложным пространственным областям простым однократным интегрированием. При этом, в частности, исчезает вклад процессов переброса (в сфере с радиусом q_0 вокруг состояния \mathbf{k} могут оказаться заполненные состояния не только из первой, но и из второй зоны Бриллюэна). Поэтому возможность роста плотности состояний, G_σ вблизи ζ (т. е. эффективного уширения ступеньки функции распределения)

при учете конечного радиуса взаимодействия для некоторых положений ζ в принципе не исключена, хотя и весьма маловероятна.

Правая часть основного уравнения самосогласования (6) с уменьшением ν от 1 претерпевает существенные изменения. До тех пор пока энергия центра ступеньки E настолько мала, что полное число электронов меньше, чем $\nu N_0 / 2$, она совпадает с $V\mathcal{N}(E, T)$ (17). Однако, как только оба значения $E \pm \delta(\epsilon)$ оказываются в области ненулевых значений $g(\epsilon)$, кривая сильно уплощается и на ней возможно даже появление участков с $\partial w / \partial E < 0$. Еще один участок быстрого роста $w(E)$ лежит на правом краю зоны, когда $N_0 - N_c < \nu_0 / 2$. Зависимость $w(\epsilon)$ для некоторых видов $g(\epsilon)$ при различных ν изображена на рис. 3. Ясно, что возникновение немонотонности приводит к большему числу решений уравнения (6) и увеличивает вероятность скачкообразного изменения намагниченности (переход 1-го рода в T_c).

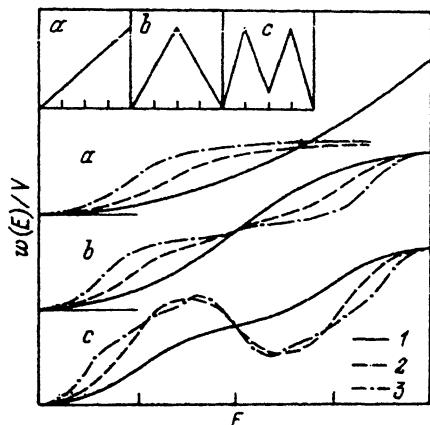


Рис. 3. Функция $w(E)/V$ при $T=0$ для различных $g(\epsilon)$ (изображены на вставке) и различных значений ν . $\nu=1.0$ (1), 0.5 (2), 0.25 (3).

Переписав уравнение (7) по аналогии с (13), (21) в виде

$$2V \int d\epsilon g(\epsilon) \tilde{W}(\epsilon, T) = 1,$$

$$\tilde{W}(\epsilon, T) = \frac{1}{\Delta} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma n_{\sigma}(\epsilon) \theta(\delta(E_{\sigma}) - |E_{\sigma} - \epsilon|), \quad (27)$$

приходим к выводу, что нормировка функции W в отличие от модели Стонера не сохраняется. При $\delta \gg T$

$$\int d\epsilon \tilde{W}(\epsilon, T) = (\tilde{N}_+ - \tilde{N}_-) / \Delta, \quad (28)$$

где N_{σ} — число электронов в слое $E_{\sigma} - \delta(E_{\sigma}) \leq \epsilon \leq E_{\sigma} + \delta(E_{\sigma})$ (при $T \ll \delta$ это фактически число электронов в слое $E_{\sigma} - \delta(E_{\sigma}) \leq \epsilon \leq (E_{\sigma})$). В силу (21) это число не слишком сильно отличается от $\nu N_0 / 2$, если только E_{σ} не слишком близко к краю зоны. Величина N_{σ} меняется в зависимости от положения E_{σ} : если E_{σ} находится на правом склоне пика $g(\epsilon)$, N_{σ} больше; если на левом, — меньше и слабо связана с Δ , что и приводит к непостоянству нормировки (28).

Результаты численных расчетов $m(T)$ для некоторых типов плотностей состояний в модели (24), (25) приведены на рис. 4. При каждом ν значение V выбиралось таким, чтобы оставалась постоянной величина $m(0)$. Видно, что зависимости $m(T)$ примерно такие же, как и на рис. 2. Не слишком сильно выходят за пределы (16) и отношения Δ_0 / T_c .

Таким образом, наличие зависимости $V(q)$ в приближении эффективного поля (1), (2) оказывает не слишком значительное влияние на вид зависимости $m(T)$ и величину отношения Δ_0 / T_c .

Как и отношение $2\Delta / T_c$ в теории сверхпроводимости, отношение Δ_0 / T_c в теории коллективизированных магнетиков может выступать в качестве критерия

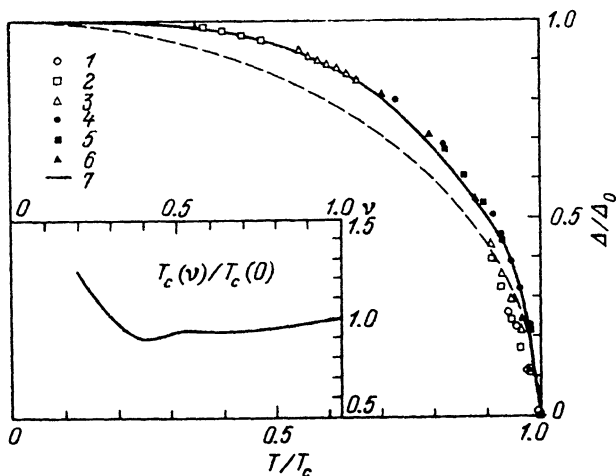


Рис. 4. Изменение формы зависимости $\Delta(T)$ с изменением доли взаимодействующих электронов ν для плотности состояний рис. 2, с.

На вставке показано соответствующее изменение T_c $\nu=0.4$ (1), 0.5 (2), 0.6 (3), 0.7 (4), 0.8 (5), 0.9 (6), 1.0 (7).

применимости приближения эффективного поля. Выход величины этого отношения за рамки (16) в большинстве случаев свидетельствует о неприменимости этого приближения. В частности, вопреки результатам работы [3], из ферромагнитных $3d$ -металлов только никель удовлетворительно описывается в рамках этой модели. Условие (16) слабо чувствительно к виду зависимости $V(q)$, и влияние ее сказывается главным образом в уменьшении полной плотности состояний вблизи химпотенциала или, что то же самое, в уменьшении числа состояний с заполнением, отличным от 0 и 1.

Авторы благодарны Ю. П. Ирхину за внимание к работе.

Список литературы

- [1] Wohlfarth E. P. // Proc. Int. Conf. Magn. Nottingham. 1964. P. 51—52.
- [2] Ирхин Ю. П., Розенфельд Е. В., Сивенцев А. А. // ФТТ. 1991. т. 33 № 6. С. 1646—1653.
- [3] Mohn P., Wohlfarth E. P. // J. Phys. F. 1987. V. 17. N 12. P. 2421—2429.

Институт физики металлов
УрО РАН
Свердловск

Поступило в Редакцию
13 февраля 1992 г.