

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.20.Be, 71.27.+a, 72.10.Bg, 72.15.Qm, 72.25.Ba, 75.10.-b

Теория спин-зависимого транспорта в системах с сильными электронными корреляциями

С. П. Репецкий, А. Г. Наконечный, Б. В. Стацук

*Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,
ул. Владимирская, 64,
01033 Киев, Украина*

Получено выражение для двухчастичной функции Грина (электропроводности) магнитных кристаллов с сильными электронными корреляциями. Учитываются процессы рассеяния электронов на флуктуациях спиновой и электронной плотностей. Электронные состояния описываются в рамках многозонной модели сильной связи. Расчеты базируются 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. Показано, что вклады процессов рассеяния электронов на кластерах уменьшаются с увеличением числа узлов в кластере по некоторому малому параметру. На примере кристалла железа исследованы условия возникновения спин-зависимого транспорта в системах с сильными электронными корреляциями.

Одержано вираз для двочастинкової Грінової функції (електропровідності) магнетних кристалів із сильними електронними кореляціями. Враховуються процеси розсіяння електронів на флюктуаціях спінової й електронної густин. Електронні стани описуються в рамках багатозонного моделю сильного зв'язку. Розрахунки базуються на діяграмній техніці для температурних Грінових функцій. Одержано кластерне розвинення для двочастинкової Грінової функції. За нульове одноузельне наближення в кластерному розвиненні обирається наближення когерентного потенціалу. Показано, що внески процесів розсіяння електронів на кластерах зменшуються зі збільшенням числа вузлів у кластері за деяким малим параметром. На прикладі кристала заліза досліджено умови виникнення спин-залежного транспорту в системах із сильними електронними кореляціями.

An expression for two-particle Green's function (electroconductivity) of magnetic crystals with strong electron correlations is obtained. The processes of electron scattering by fluctuations of spin and electron densities are taken into consideration. The electron states of the system are described within the

scope of the multiband tight-binding model. Calculations are based on the diagram technique for temperature Green's functions. Cluster expansion for two-particle Green's function is obtained. The coherent potential approximation (CPA) is chosen as a zero-order one-site approximation for this expansion. As shown, the contributions from the processes of scattering by clusters decrease as the number of atoms in a cluster increases, and this decrease can be parameterized by a certain small parameter. Conditions for appearance of spin-dependent transport in systems with strong electron correlations are studied as applied to the iron single crystal as an example.

Ключевые слова: двухчастичная функция Грина, приближение когерентного потенциала, кристаллы с сильными электронными корреляциями, модель Хаббарда электронной структуры, электропроводность систем с узкими энергетическими зонами.

(Получено 12 апреля 2009 г.)

1. ВСТУПЛЕНИЕ

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 слу-

чай 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, 12] 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 [13]. Исследование этого параметра [11, 12, 14, 15] 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 во всех указанных выше работах не учитывались электронные корреляции, которые могут существенно влиять на свойства систем на основе переходных и редкоземельных элементов.

В работе [16] 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 [16] метода для описания структурных и магнитных фазовых превращений в сплавах продемонстрирована в работе [17].

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 [18].

В настоящей работе с использованием предложенного ранее в работе [16] метода развита теория электропроводности кристаллов с сильными электронными корреляциями.

Учитываются процессы рассеяния электронов на флуктуациях

спиновой и электронной плотности. Получено выражение для двухчастичной функции Грина (электропроводности) магнитного кристалла.

Электронные состояния в данном методе описываются в рамках многозонной модели сильной связи. Расчеты базируются на диаграммной технике для температурных функций Грина.

Демонстрируется применение развитого здесь подхода к описанию спин-зависимого транспорта в кристаллах переходных металлов. Определены условия возникновения эффекта спин-зависимого транспорта в кристаллах при наличии внешнего магнитного поля.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Гамильтониан системы электронов и фононов кристалла в представлении Ванье имеет вид [16]

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

где гамильтониан нулевого приближения H_0 представляет собой гамильтониан подсистемы невзаимодействующих электронов:

$$H_{e0} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}. \quad (2)$$

Гамильтониан возмущения H_{int} в формуле (1) описывает парное электрон-электронное взаимодействие:

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2 \\ n_3 i_3 \gamma_3 \\ n_4 i_4 \gamma_4}} v_{n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}^{(2) n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}^+ a_{n_3 i_3 \gamma_3} a_{n_4 i_4 \gamma_4}, \quad (3)$$

где $a_{ni\gamma}^+$, $a_{ni\gamma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии, которое описывается функцией Ванье $\phi_{ni\gamma}(\xi) = \langle \xi | ni\gamma \rangle$, $\xi = (\mathbf{r}, s)$; 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 кристалла.

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

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{ni} v^{ni}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}),$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор электрона; $\mathbf{r}_{ni} = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i$ — радиус-вектор равновесного положения атома в узле (ni) кристаллической решетки.

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 [19, 20]:

$$\begin{aligned} G_r^{AB}(t, t') &\equiv \left\langle \left\langle \tilde{A}(t) \mid \tilde{B}(t') \right\rangle \right\rangle_r = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle, \\ G_a^{AB}(t, t') &\equiv \left\langle \left\langle \tilde{A}(t) \mid \tilde{B}(t') \right\rangle \right\rangle_a = \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Оператор в изображении Гейзенберга

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

где $H = H - \mu_e N_e$; μ_e , N_e — соответственно химический потенциал и оператор числа электронов; $\theta(t)$ — функция Хевисайда. Скобки $\langle \dots \rangle$ в (4) означают 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 (4) проводится по состояниям системы электронов и фононов в реальном кристалле при заданном расположении атомов.

Расчет двухчасовых запаздывающих и опережающих функций Грина (4) базируется на расчете температурных функций Грина. При этом используется известное соотношение между спектральными представлениями для запаздывающей, опережающей и температурной функции Грина [19].

Определим температурную функцию Грина соотношением

$$G^{AB}(\tau, \tau') = -\left\langle T_\tau \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(\tau') \right\rangle, \quad (5)$$

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

$$\sigma(\tau) = e^{H_0\tau} e^{-H\tau}, \quad (6)$$

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 (6), имеет вид:

$$\sigma(\tau) = T_{\tau} \exp \left[- \int_0^{\tau} H_{\text{int}}(\tau') d\tau' \right]. \quad (7)$$

Учитывая выражение (6), для оператора A в изображении Гейзенберга можно написать:

$$\tilde{A}(\tau) = \sigma^{-1}(\tau) A(\tau) \sigma(\tau). \quad (8)$$

Выражение (5) для температурной функции Грина с учетом (6), (8) можно привести к виду:

$$G^{AB}(\tau, \tau') = - \langle T_{\tau} A(\tau) B(\tau') \sigma(1 / \Theta) \rangle_0 / \langle \sigma(1 / \Theta) \rangle_0, \quad (9)$$

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

Раскладывая экспоненту в выражении (7) для $\sigma(\tau)$ в ряд по степеням $H_{\text{int}}(\tau)$, подставляя результат в (9) и используя теорему Вика [19, 20], для расчета температурных функций Грина неупорядоченного кристалла можно построить диаграммную технику, аналогичную диаграммной технике для однородной системы [19].

Используя известные соотношения между спектральными представлениями температурной и временной функций Грина [19], путем аналитического продолжения на действительную ось получим систему уравнений для запаздывающих функций Грина (индекс r здесь и в дальнейшем будем опускать) [16]:

$$G^{aa^+}(\varepsilon) = G_0^{aa^+}(\varepsilon) + G_0^{aa^+}(\varepsilon) \Sigma_{ee}(\varepsilon) G^{aa^+}(\varepsilon), \quad (10)$$

где $G^{aa^+}(\varepsilon)$ — одночастичная запаздывающая функция Грина системы электронов.

Из уравнений движения для функций Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$ можно получить:

$$G_0^{aa^+}(\varepsilon) = [\varepsilon - H_0^{(1)}]^{-1}, \quad H_0^{(1)} = \|\| h_{ni\gamma, n'i'\gamma}^{(0)} \|\|. \quad (11)$$

Представим решение уравнения (10) в виде:

$$G^{aa^+}(\varepsilon) = \left[[G_0^{aa^+}(\varepsilon)]^{-1} - \Sigma_{ee}(\varepsilon) \right]^{-1}. \quad (12)$$

Явное выражение для массового оператора функций Грина, которое описывает многочастичные взаимодействия в системе, можно найти, воспользовавшись диаграммной техникой [19]. В результате имеем [16]:

$$\Sigma_{ee\ ni\gamma, n'i'\gamma'}(\varepsilon) = \Sigma_{ee}^{(1)}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}^{(2)}(\varepsilon), \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma_{ee n, n'}^{(1)} &= -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\varepsilon') \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} \left[G_{n_1, n_2}^{aa^+}(\varepsilon') - G_{n_2, n_1}^{aa^+ *}(\varepsilon') \right], \\ \Sigma_{ee n, n'}^{(2)}(\varepsilon) &= -\left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_2 \tilde{v}_{n_2, n_1}^{(2)n, n_3} \times \\ &\times \left\{ f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \left[G_{n_5, n_2}^{aa^+ *}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_4, n_1}^{aa^+ *}(\varepsilon_1) \right] \times \right. \\ &\times \left[G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_3, n_6}^{aa^+ *}(\varepsilon_2) \right] + f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \left[G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_5, n_2}^{aa^+ *}(\varepsilon_2) \right] \times \\ &\times \left. \left[G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) - G_{n_4, n_1}^{aa^+ *}(\varepsilon_1) G_{n_3, n_6}^{aa^+ *}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \right] \right\} \tilde{v}_{n_6, n'}^{(2)n_4, n_5}, \\ \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} &= v_{n_1, n'}^{(2)n, n_2} - v_{n', n_1}^{(2)n, n_2} \quad (n \equiv ni\gamma). \end{aligned} \quad (14)$$

При получении выражений (13), (14) для массового оператора верхняя часть бралась для простоты в нулевом приближении.

Для получения плотностей состояний системы электронов необходимо усреднить выражения (12) по расположениям атомов в узлах решетки. В результате для плотности электронных состояний на один атом можно написать:

$$g(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi v N} \text{Im Sp} \left\langle G^{aa^+}(\varepsilon) \right\rangle_c. \quad (15)$$

В кристаллах с сильными электронными корреляциями на узлах кристаллической решетки возникают локализованные магнитные моменты. В выражении (15) скобки $\langle \dots \rangle_c$ означают усреднение по разным ориентациям локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки (конфигурационное усреднение); N — число элементарных ячеек; v — число атомов в элементарной ячейке. Для сокращения записи в дальнейшем индекс c возле скобки $\langle \dots \rangle_c$ будет опускаться.

Выражение (12) отличается от соответствующего выражения для функции Грина одночастичных гамильтонианов неупорядоченной системы лишь видом массового оператора. В связи с этим для выполнения конфигурационного усреднения в формуле (15) воспользуемся хорошо известными методами теории неупорядоченных систем [11, 12].

Выполним кластерное разложение для функций Грина $G^{aa^+}(\epsilon)$ в выражениях (12), (13), представив массовый оператор в виде суммы одноузельных операторов и выбрав как нулевое одноузельное приближение функции Грина эффективной среды. Указанное разложение является обобщением кластерного разложения для функции Грина $G^{aa^+}(\epsilon)$ одночастичного гамильтониана [11, 12]. Функцию Грина эффективной среды для системы электронов определим выражением

$$\tilde{G}^{aa^+}(\epsilon) = \left[\left[G_0^{aa^+}(\epsilon) \right]^{-1} - \left(\tilde{\Sigma}_{ee}(\epsilon) + \sigma(\epsilon) \right) \right]^{-1}. \quad (16)$$

В выражении (16) $\sigma(\epsilon)$ — потенциалы эффективной среды (когерентные потенциалы), значения которых будут отмечены ниже.

Функции Грина (12) удовлетворяют известному уравнению Дайсона:

$$G(\epsilon) = \tilde{G}(\epsilon) + \tilde{G}(\epsilon)\tilde{\Sigma}(\epsilon)G(\epsilon), \quad (17)$$

где для системы электронов

$$\tilde{\Sigma}(\epsilon) = \Sigma_{ee}(\epsilon) - \tilde{\Sigma}_{ee}(\epsilon) - \sigma_e(\epsilon). \quad (18)$$

Оператор T -матрицы рассеяния определяется соотношением:

$$G(\epsilon) = \tilde{G}(\epsilon) + \tilde{G}(\epsilon)T(\epsilon)\tilde{G}(\epsilon) \quad (19)$$

и удовлетворяет уравнению

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

которое следует из уравнений (17) и (19). Представим массовые операторы в виде суммы одноузельных операторов:

$$\tilde{\Sigma}(\epsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1}(\epsilon); \quad (20)$$

получим для оператора T -матрицы рассеяния выражение:

$$T(\epsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} T^{n_1 i_1}(\epsilon), \quad (21)$$

где

$$T^{n_1 i_1} = t^{n_1 i_1} + t^{n_1 i_1} \tilde{G} \sum_{(n_2 i_2) \neq (n_1 i_1)} T^{n_2 i_2}, \quad (22)$$

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

$$t^{n_1 i_1} = [I - \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1} \tilde{G}]^{-1} \tilde{\Sigma}^{n_1 i_1}. \quad (23)$$

Решая систему уравнений (22) 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, [11]):

$$T = \sum_{(n_1 i_1)} t^{n_1 i_1} + \sum_{(n_1 i_1) \neq (n_2 i_2)} T^{(2) n_1 i_1, n_2 i_2} + \dots \quad (24)$$

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

Согласно выражению (19), конфигурационное среднее от функции Грина $G(\epsilon)$ выражается через среднее от T -матрицы рассеяния. В работе [16] установлено, что вклады в усредненную функцию Грина $\langle G(\epsilon) \rangle$ 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.

Когерентный потенциал определяется из условия $\langle t^{0 i_1} \rangle = 0$ и удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \sigma^{0 i_1}(\epsilon) &= \left\langle \left[1 - (\Sigma^{0 i_1}(\epsilon) - \sigma^{0 i_1}(\epsilon)) \tilde{G}^{aa^+} \right]^{-1} \right\rangle^{-1} \times \\ &\times \left\langle \left[1 - (\Sigma^{0 i_1}(\epsilon) - \sigma^{0 i_1}(\epsilon)) \tilde{G}^{aa^+} \right]^{-1} \Sigma^{0 i_1}(\epsilon) \right\rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Функция Грина эффективной среды $\tilde{G}(\epsilon)$ определяется из выражения

$$\tilde{G}_{ni\gamma, n'i'\gamma'}(\epsilon) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \epsilon) e^{i\mathbf{k} \cdot (\tilde{r}_n + \tilde{\rho}_i - \tilde{r}_{n'} - \tilde{\rho}_{i'})}, \quad (26)$$

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

Для системы электронов функции $\tilde{G}_{i\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \epsilon)$ являются элемен-

тами матрицы

$$\tilde{G}^{aa^+}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \left\| \varepsilon \delta_{\eta' \eta'} \delta_{ii'} - h_{i\gamma, i'\gamma}^{(0)}(\mathbf{k}) - \tilde{\Sigma}_{eei\gamma, i'\gamma}(\mathbf{k}, \varepsilon) - \sigma_{e i\gamma, i'\gamma}(\mathbf{k}, \varepsilon) \right\|^{-1}, \quad (27)$$

где

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

Термодинамический потенциал системы определяется выражением (см. (4))

$$\Omega = -\Theta \ln \text{Sp}(e^{-H/\Theta}). \quad (28)$$

Воспользовавшись формулой (6), из (28) получим:

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega', \quad (29)$$

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

Термодинамический потенциал Ω_0 в формуле (29) в отсутствие взаимодействия можно записать в виде

$$\Omega_0 = \Omega_c + \Omega_{0e}. \quad (30)$$

Термодинамический потенциал электронной подсистемы

$$\Omega_{0e} = -vN\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{(\mu_e - \varepsilon)/\Theta}) g_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (31)$$

В выражении (31) плотность состояний электронов $g_0(\varepsilon)$ дается формулой (15), в которой $G^{aa^+}(\varepsilon)$ заменена функцией Грина нулевого приближения $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$.

Конфигурационная составляющая термодинамического потенциала Ω_c в формуле (30), зависящая от распределения локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки, есть

$$\Omega_c = \langle \Phi_0 \rangle - \Theta S_c, \quad (32)$$

где S_c — конфигурационная энтропия; Φ_0 — энергия электростатического взаимодействия ионных остовов.

Добавка к термодинамическому потенциалу, обусловленная вкладами процессов рассеяния электронов и фононов, равна [16]

$$\Omega' = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon) \text{Sp} \langle \Sigma_{ee}(\varepsilon, \lambda) G^{aa^+}(\varepsilon, \lambda) \rangle \right], \quad (33)$$

где $f(\varepsilon)$ — функция Ферми.

Свободная энергия F связана с термодинамическим потенциалом Ω соотношением

$$F = \Omega + \mu_e \langle N_e \rangle, \quad (34)$$

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

Уровень Ферми μ_e системы определяется из уравнения

$$\langle Z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \mu_e) g_e(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (35)$$

где $g_e(\varepsilon)$ дается формулой (15); $\langle Z \rangle = \langle N_e \rangle / \nu N$ — среднее число электронов, приходящихся на один атом.

Для расчета тензора электропроводности воспользуемся формулой Кубо [21]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^{\Theta^{-1}} \int_0^{\infty} e^{i\omega\tau - \varepsilon\tau} \langle J_\beta(0) J_\alpha(t + i\hbar\tau) \rangle d\tau dt, \quad (36)$$

где J_α — оператор α -проекции плотности тока.

Из выражения (36) получаем:

$$\text{Re } \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\hbar\omega} \left[G_r^{J_\alpha J_\beta}(\omega) - G_a^{J_\alpha J_\beta}(\omega) \right]. \quad (37)$$

Выражение (37) 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; 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) (37) 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 (9) в этом случае —

$$G^{J_\alpha J_\beta}(\tau, \tau') = \frac{e^2}{NV_1} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} v_{\alpha n_4 n_2} v_{\beta n_3 n_1} G''(n_1 \tau', n_2 \tau, n_3 \tau', n_4 \tau), \quad (38)$$

где двухчастичная функция Грина

$$\begin{aligned} G''(n_1 \tau', n_2 \tau, n_3 \tau', n_4 \tau) = \\ = \left\langle T_\tau a_{n_1}(\tau') a_{n_2}(\tau) a_{n_3}^+(\tau') a_{n_4}^+(\tau) \sigma(\frac{1}{\theta}) \right\rangle_0 \left\langle \sigma(\frac{1}{\theta}) \right\rangle_0^{-1} \quad (n = ni\gamma), \end{aligned} \quad (39)$$

V_1 — объем элементарной ячейки.

Раскладывая экспоненту в выражении (7) для $\sigma(\tau)$ в ряд по степеням $H_{\text{int}}(\tau)$, подставляя результат в (39) и используя теорему Вика [19, 20], для расчета двухчастичной температурной функции Грина неупорядоченного кристалла можно построить диаграммную технику, аналогичную диаграммной технике для однородной системы [19]. Знаменатель в формуле (39) 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 [19], путем аналитического продолжения на действительную ось получим с учетом (37) следующее выражение для действительной части тензора электропроводности системы:

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \\ = \frac{e^2 \hbar}{4\pi N V_1 \varepsilon} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 [f(\varepsilon_1 + \varepsilon) - f(\varepsilon_1)] \text{Sp} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) v_\beta K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \right], \end{aligned} \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) = G^{aa^+}(\varepsilon_1^{s'}) v_\alpha G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon), \\ G^{aa^+}(\varepsilon_1^-) = G_a^{aa^+}(\varepsilon_1) = (G_r^{aa^+})^+(\varepsilon_1). \end{aligned} \quad (41)$$

Вершинная часть двухчастичной функции Грина $\Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon)$ в формуле (40) в первом порядке по потенциалу парного электрон-электронного взаимодействия $\tilde{v}_{n_3 n_4}^{(2)n_1 n_2}$ имеет вид:

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

$$\begin{aligned}
 & \times \left[G_{an_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) G_{rn_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) - G_{rn_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) G_{an_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) \right] + \\
 & + G_{an_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) \left[G_{rn_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{an_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{an_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) \left[G_{rn_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{an_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] - \\
 & - G_{rn_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) \left[G_{rn_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{an_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{rn_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2 - \varepsilon) \left[G_{rn_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{an_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] + \\
 & + \left[G_{an_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) G_{rn_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) - G_{rn_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1 - \varepsilon) G_{an_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \right] \times \\
 & \quad \times \left[G_{rn_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{an_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \left[G_{rn_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{an_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] + \\
 & \quad + \left[G_{rn_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{an_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] G_{rn_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \times \\
 & \times \left[G_{rn_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{an_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{rn_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) - \left[G_{rn_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{an_1n_6}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] G_{an_2n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2 + \varepsilon) \times \\
 & \quad \times \left[G_{rn_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{an_7n_4}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{an_8n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon) \Big\}. \quad (42)
 \end{aligned}$$

Выражение (42) написано в пренебрежении перенормировкой вершинной части массового оператора электрон-электронного взаимодействия.

Тензор электропроводности сплава $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ зависит от случайной ориентации локализованных магнитных моментов 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 (41) 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 [11]. В результате для тензора электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ получим:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re} \sigma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{e^2 \hbar}{4\pi N V_1 \varepsilon} \times \\
 & \times \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \left[f(\varepsilon_1 + \varepsilon) - f(\varepsilon_1) \right] \operatorname{Sp} \sum_{s,s'=+,-} (2\delta_{ss'} - 1) v_{\beta} \left\langle K(\varepsilon_1^s, v_{\alpha}, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right\rangle + \right. \\
 & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \left\langle \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \right\rangle \right], \quad (43)
 \end{aligned}$$

где

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

Оператор α -проекции скорости электрона v_α в формуле (43) 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

$$\langle \Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon) \rangle \approx \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon), \quad (44)$$

где $\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon)$ получаем из выражения (42) путем замены $G^{aa^+}(\varepsilon^s)$ на $\tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon^s)$.

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 (13) число электронов $Z_{ni\gamma s}^{m_i}$ 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 локализованного магнитного момента m_i в данном узле (ni) . Значение $Z_{ni\gamma s}^{m_i}$ определяется выражением (35), в котором плотность электронных состояний $g_e(\varepsilon)$ заменена условной парциальной плотностью состояний $g_{ni\gamma s}^{m_i}(\varepsilon)$ для энергетической зоны γ и проекции спина s . Плотность состояний $g_{ni\gamma s}^{m_i}(\varepsilon)$ дается выражением

$$g_{ni\gamma s}^{m_i}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle G_{ni\gamma s, ni\gamma s}^{aa^+}(\varepsilon) \rangle \Big|_{(ni) \in m_i}, \quad (45)$$

в котором усреднение проводится при условии, что в узле (ni) проекция локализованного магнитного момента электрона равняется m_i . Обозначив вероятность указанного события через $P_{ni}^{m_i}$,

можно написать $\sum_{m_i} P_{ni}^{m_i} = 1$.

Можно записать уравнения:

$$Z_{ni\gamma}^{m_i} = Z_{ni\gamma s}^{m_i} + Z_{ni\gamma, -s}^{m_i}, \quad m_{i\gamma} = Z_{ni\gamma s}^{m_i} - Z_{ni\gamma, -s}^{m_i}, \quad (46)$$

причем $Z_{ni}^{m_i} = \sum_{\gamma} Z_{ni\gamma}^{m_i}$, $m_i = \sum_{\gamma} m_{i\gamma}$ — соответственно число электронов и значения проекции магнитного момента атома в узле (ni).

Из выражений (46) следует, что вместе с флуктуациями локализованного магнитного момента m_i в системе могут возникать флуктуации зарядовой плотности $Z_{ni}^{m_i}$ относительно среднего значения $\langle Z \rangle$. Из уравнений (46) получим:

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

Флуктуации локализованного магнитного момента m_i возникают при достаточно больших значениях потенциала кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле $\tilde{v}_{ni\gamma, -s, ni\gamma s}^{(2) ni\gamma s, ni\gamma, -s}$ в выражении (13) для массового оператора электрон-электронного взаимодействия $\Sigma_{ee}(\epsilon)$, 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 (15) необходимо провести конфигурационное усреднение по ориентациям локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

Как показано в работе [16], 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 (15) выражения (19), (24), для плотности электронных состояний в пренебрежении процессами рассеяния на кластерах из трех и более узлов получим

$$g(\epsilon) = \frac{1}{v} \sum_{i, \gamma, s, m_i} P_{i0}^{m_i} g_{i0\gamma s}^{m_i}(\epsilon),$$

где условная парциальная плотность состояний равна

$$\begin{aligned}
g_{i_0 i_0 \gamma_s}^{m_i}(\varepsilon) = & -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{G}_{i_0, i_0} + \tilde{G}_{i_0, i_0} t_{i_0}^{m_i} \tilde{G}_{i_0, i_0} + \sum_{\substack{(jl) \neq (i_0) \\ m_j}} P_{jl i_0}^{m_j/m_i} \times \right. \\
& \times \left[\tilde{G}_{i_0, i_0} [I - t_{i_0}^{m_i} \tilde{G}_{i_0, jl} t_{jl}^{m_j} \tilde{G}_{jl, i_0} I^{-1} t_{i_0}^{m_i} \tilde{G}_{i_0, jl} t_{jl}^{m_j} (\tilde{G}_{jl, i_0} + \tilde{G}_{jl, i_0} t_{i_0}^{m_i} \tilde{G}_{i_0, i_0}) + \right. \\
& \left. \left. + \tilde{G}_{i_0, jl} [I - t_{jl}^{m_j} \tilde{G}_{jl, i_0} t_{i_0}^{m_i} \tilde{G}_{i_0, jl} I^{-1} t_{jl}^{m_j} \tilde{G}_{jl, i_0} t_{i_0}^{m_i} (\tilde{G}_{i_0, i_0} + \tilde{G}_{i_0, jl} t_{jl}^{m_j} \tilde{G}_{jl, i_0})] \right] \right\}^{\gamma_s, \gamma_s}. \quad (47)
\end{aligned}$$

Величины, которые стоят в выражении (47), являются матрицами по отношению к индексам энергетических зон $\gamma_1 s_1, \gamma_2 s_2$.

В выражении (47) $P_{jl i_0}^{m_j/m_i}$ — условная вероятность найти в узле (lj) атом с проекцией локализованного магнитного момента m_j при условии, что в узле ($0i$) находится атом с проекцией локализованного магнитного момента m_i , а $t_{in}^{m_i}$ — значение матричных элементов одноцентровых операторов рассеяния для случая, когда в узле (ni) находится атом с проекцией локализованного магнитного момента m_i .

Для упрощения допустим, что проекции локализованного магнитного момента на ось z принимают значение $m_i = \mu_i^+, \mu_i^-$. Связь вероятности $P_{i_0}^{m_i}$ с параметром дальнего магнитного порядка η_m определяется выражениями: $P_{i_0}^{\mu_i^+} = x_{\mu_i^+} - \frac{v_2}{v} \eta_m$ для v_1 подрешеток I типа и $P_{i_0}^{\mu_i^+} = x_{\mu_i^+} + \frac{v_1}{v} \eta_m$ для v_2 подрешеток II типа $P_{i_0}^{\mu_i^-} = 1 - P_{i_0}^{\mu_i^+}$; $x_{\mu_i^+}, x_{\mu_i^-} = 1 - x_{\mu_i^+}$ равны соответственно относительному числу узлов кристаллической решетки с проекциями локализованных магнитных моментов μ_i^+, μ_i^- .

Условные вероятности $P_{jl i_0}^{m_j/m_i}$ определяются выражениями $P_{jl i_0}^{m_j/m_i} = P_{i_0}^{m_i} P_{jl i_0}^{m_j/m_i} = \langle c_{jl}^{m_j} c_{i_0}^{m_i} \rangle$ и связаны с параметрами парных межатомных корреляций и парных корреляций в ориентации локализованных магнитных моментов $\varepsilon_{jli_0}^{\mu_j^-, \mu_i^-}$ соотношениями [16]:

$$P_{jl i_0}^{m_j/m_i} = P_{jl}^{m_j} + \frac{\varepsilon_{jl i_0}^{\mu_j^-, \mu_i^-}}{P_{i_0}^{m_i}} \left(\delta_{m_j, \mu_j^-} - \delta_{m_j, \mu_j^+} \right) \left(\delta_{m_i, \mu_i^-} - \delta_{m_i, \mu_i^+} \right), \quad (48)$$

где δ_{m, μ^+} — символы Кронекера, $\varepsilon_{jli_0}^{\mu_j^-, \mu_i^-} = \langle (c_{jl}^{\mu_j^-} - c_j^{\mu_j^-}) (c_{i_0}^{\mu_i^-} - c_i^{\mu_i^-}) \rangle$.

Таким образом, система описывается двумя параметрами корреляции

ляции: η_m и $\varepsilon_{jli0}^{\mu_j \mu_i^-}$.

Функции Грина системы электронов и свободная энергия F (34) зависят от числа электронов на атом с различными значениями проекций спина электронов на выделенное направление, т.е. распределения локализованных магнитных моментов на узлах кристаллической решетки.

Конфигурационная энтропия кристалла S_c в выражении (32) связана с вероятностями ориентации локализованных магнитных моментов на узлах решетки $P_{n_1 i_1 \dots n_v i_v}^{m_{i_1} \dots m_{i_v}}$ соотношением [22]

$$S_c = - \left[\sum_{(n_1 i_1)} P_{n_1 i_1}^{m_{i_1}} \ln P_{n_1 i_1}^{m_{i_1}} + \frac{1}{2} \sum_{(n_1 i_1) \neq (n_2 i_2)} P_{n_1 i_1, n_2 i_2}^{m_{i_1}, m_{i_2}} \ln \frac{P_{n_1 i_1, n_2 i_2}^{m_{i_1}, m_{i_2}}}{P_{n_1 i_1}^{m_{i_1}} P_{n_2 i_2}^{m_{i_2}}} + \dots \right]. \quad (49)$$

Равновесные значения проекций локализованных магнитных моментов μ_i^+ , μ_i^- , параметров корреляции η_m , $\varepsilon_{jli0}^{\mu_j \mu_i^-}$, а также относительное число узлов кристаллической решетки x_{μ^+} с проекциями локализованных магнитных моментов μ_i^+ находятся из условия минимума свободной энергии. При отсутствии внешнего магнитного поля значения проекций μ_i^+ , $\mu_i^- = -\mu_i^+$ отвечают ориентации локализованных магнитных моментов вдоль и против оси z , а $x_{\mu^+} = x_{\mu^-} = 0,5$.

Для расчета тензора электропроводности необходимо в выражении (43) провести конфигурационное усреднение 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 [16], получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \text{Sp} v_\beta \langle K(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \rangle &= \sum_{\gamma, s, i} \left\{ \left[v_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{i0i0} + \right. \\ &+ \sum_{m_i} P_{i0}^{m_i} \sum_{\substack{jl \neq i0 \\ m_j}} P_{jl i0}^{m_j/m_i} \left[\left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{i0i0} T_{(i0, jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \right. \\ &+ \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha G(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \right]_{i0jl} T_{(jl, i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\ &+ \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) v_\beta G(\varepsilon_1^s) \right]_{i0i0} T_{(i0, jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^s) + \\ &\left. + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) v_\beta G(\varepsilon_1^s) \right]_{i0jl} \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times T_{(jl,i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) + \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon, v_\beta, \varepsilon_1^s) \times \\
& \times (t_{jl}^{m_j}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) t_{i0}^{m_i}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
& + t_{jl}^{m_j}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
& + T_{(jl,i0)}^{(2d)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \times \\
& \times t_{i0}^{m_i}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + T_{(jl,i0)}^{(2d)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jmi0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) + \\
& + T_{(jl,i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) T_{(jl,i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^{s'} + \varepsilon) \Big] \Big\}^{\gamma_s, \gamma_s}, \quad (50)
\end{aligned}$$

где

$$T_{(i0,jl)}^{(2n)m_i m_j} = \left[I - t_{i0}^{m_i} \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{m_j} \tilde{G}_{(jl,i0)} \right]^{-1} t_{i0}^{m_i} \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{m_j}, \quad T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j} = T_{(i0,jl)}^{(2n)m_i m_j} \tilde{G} t_{i0}^{m_i}.$$

Величины, которые стоят в выражениях (50), 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 (35) для уровня Ферми дается выражением:

$$\langle Z \rangle = \frac{1}{v} \sum_{i, \gamma, s, m_i} P_{i0}^{m_i} Z_{i0\gamma s}^{m_i}.$$

В выражениях (43), (44), (50) для электропроводности учитывается рассеяние электронов на флуктуациях спиновой и электронной плотностей. Статическая проводимость сплава получается из выражений (43), (44), (50) предельным переходом $\omega \rightarrow 0$. Таким образом, для статической проводимости имеем:

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha\beta} = & \frac{e^2 \hbar}{4\pi V_1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_1} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \sum_{\gamma, s, i} \left\{ \left[v_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0i0} + \sum_{m_i} P_{i0}^{m_i} \times \right. \right. \\
& \times \sum_{\substack{jl \neq i0 \\ \lambda', m_\lambda}} P_{jl}^{m_j/m_i} \left[\left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0i0} T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'}) + \right. \\
& + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^{s'}) + \left. \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{i0i0} \times \right. \\
& \times T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^s) + \left. \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{i0jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) + \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) \times \right. \\
& \times \left(t_{jl}^{m_j}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^{m_i}(\varepsilon_1^{s'}) + t_{jl}^{m_j}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'}) + \right. \\
& \left. \left. + T_{(jl,i0)}^{(2d)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^{m_i}(\varepsilon_1^{s'}) + T_{(jl,i0)}^{(2d)m_j m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \times \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times T_{(i0,jl)}^{(2d)m_i m_j}(\varepsilon_1^{s'}) + T_{(jl,i0)}^{(2n)m_i m_i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(jl,i0)}^{(2n)m_i m_i}(\varepsilon_1^{s'}) \Big] \Big]^{s\gamma, s\gamma} + \\
 & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \mathbf{0}) \Big\}. \quad (51)
 \end{aligned}$$

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

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

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 .

В качестве примера приведем расчет характеристик спин-зависимого транспорта в кристалле железа. 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 [23], [24]. Ортогонализация базиса выполнена по методу Лёвдина [25].

На рисунке 1 показана плотность электронных состояний, рассчитанная по формуле (15), для кристалла Fe, который находится в магнитном поле: а) $H = 0$ А/м, б) $H = 5000$ А/м.

Равновесные значения локализованных магнитных моментов μ_i^+ , μ_i^- , параметры корреляции в ориентации магнитных моментов $(\eta_m, \varepsilon_{jl i0}^{\mu_j^+ \mu_i^-})$, а также относительное число узлов кристаллической решетки x_{μ^+} с проекциями локализованных магнитных моментов μ_i^+ определялись из условия минимума свободной энергии F (34). Расчет проведен для температуры $T = 0$ К. При этой температуре кристалл находится в ферромагнитной фазе.

Зависимость статической проводимости кристалла от внешнего магнитного поля, рассчитанная по формуле (51), показана на рис. 2, а. На рисунке 2, 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 2, 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 ориента-

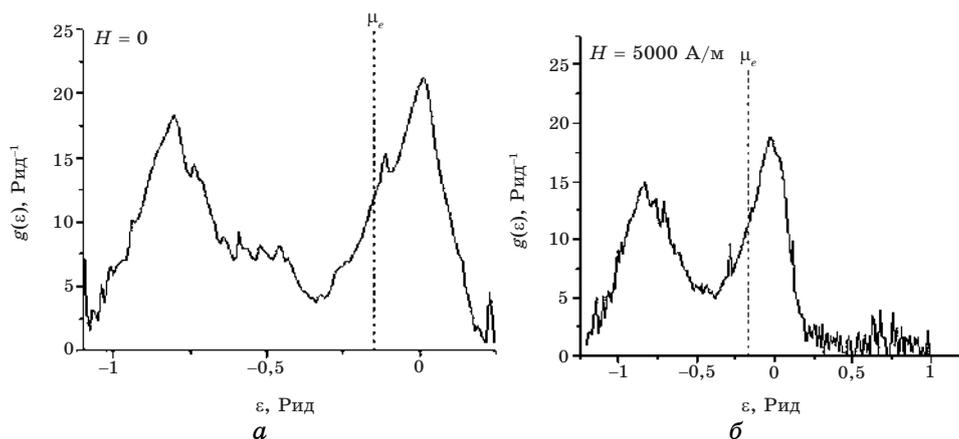


Рис. 1. Плотность электронных состояний кристалла Fe при напряженности магнитного поля H : а) $H = 0$ А/м; б) $H = 5000$ А/м.

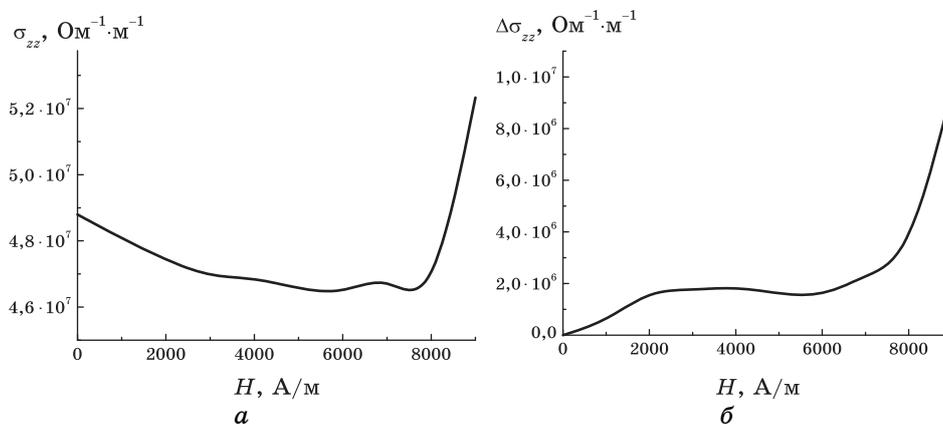


Рис. 2. Зависимость электропроводности σ_{zz} (а) и разности вкладов в электропроводность с различным направлением спинов $\Delta\sigma_{zz}$ (б) кристалла Fe от величины напряженности H внешнего магнитного поля.

цией локализованных магнитных моментов. При расчетах электропроводности последним интегралом в выражении (51) пренебрегалось. Расчет проведен для $T = 0$ К.

С целью объяснения полученных результатов на рис. 3, 4 приведена зависимость параметров магнитного порядка от внешнего магнитного поля. На рисунке 3 изображена зависимость концентрации узлов x_{μ^+} с проекцией локализованного магнитного момента, направленного вдоль внешнего магнитного поля, от величины поля.

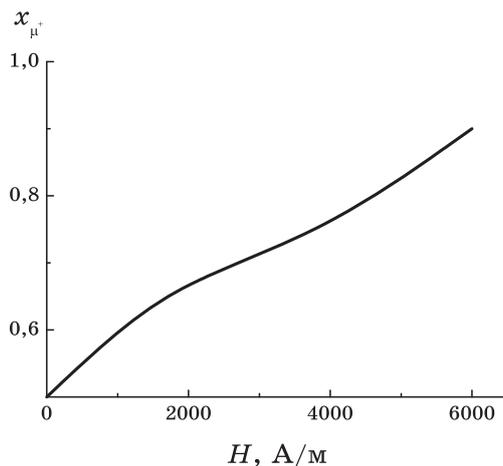


Рис. 3. Зависимость концентрации узлов $x_{\mu+}$ с проекцией локализованного магнитного момента, направленного вдоль внешнего магнитного поля, от величины поля H для кристалла Fe.

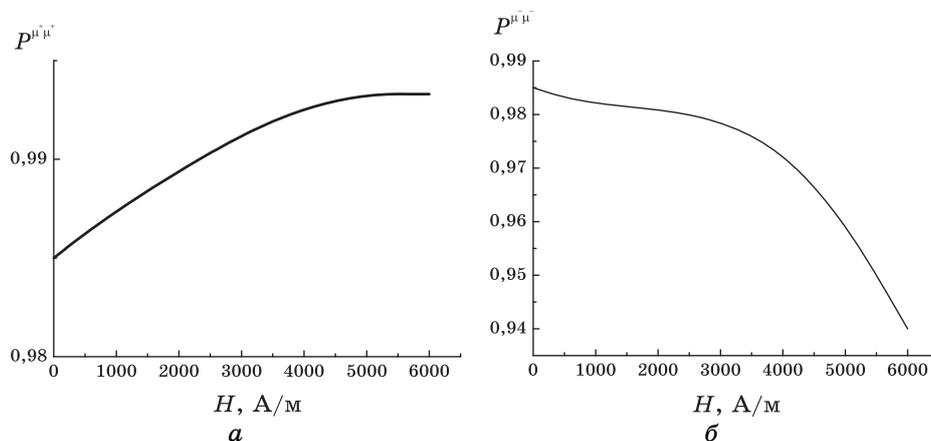


Рис. 4. Зависимость параметров корреляции $P_{ji\ i0}^{m_j/m_i}$ в ориентации локализованных магнитных моментов на соседних узлах решетки от внешнего магнитного поля H для кристалла Fe: а) магнитные моменты направлены вдоль поля; б) магнитные моменты направлены против поля.

Как видно из рис. 3, 4, с увеличением магнитного поля H степень магнитного порядка уменьшается, что проявляется на рис. 2 в уменьшении электропроводности кристалла. 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. 3), а также увеличению размеров этих областей (рис. 4). В связи с этим при возрастании поля в области выше $H = 8000$ А/м электропроводность кристалла увеличивается.

3. ВЫВОДЫ

Установлено, 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 соразориентированы преимущественно вдоль поля.

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

Получено выражение для удельной электропроводности магнитных кристаллов, что характеризуются сильными электронными корреляциями, как при отсутствии, так и при наличии внешнего магнитного поля, которое учитывает как статические так, так и динамические флуктуации зарядовой и спиновой плотностей с учетом взаимодействия электронов на разных узлах.

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. A. Razee, A. Mookerjee, and R. Prasad, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, No. 19: 3301 (1991).
4. S. S. A. Razee, S. S. Rajput, R. Prasad, and A. Mookerjee, *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, *ЛГМФ*, **90**, № 1: 128 (1992).
11. V. F. Los' and S. P. Repetsky, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**: 1707 (1994).
12. S. P. Repetsky, Ye. G. Len, and N. V. Chubinsky, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 867 (1999).
13. F. Ducastelle, *J. Phys. C*, **7**, No. 10: 1795 (1974).
14. G. Treglia, F. Ducastelle, and F. Gautier, *J. Phys. F*, **8**, No. 7: 437 (1978).
15. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, *ФТТ*, **36**, № 1: 94 (1994).

16. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатный, *ТМФ*, **131**, № 3: 456 (2002).
17. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатный, *ФММ*, **96**, № 1: 18 (2003).
18. R. Flederling, M. Kelm, G. Reuseher, W. Ossan, G. Schmidt, A. Waag, and L. W. Molencamp, *Nature*, **402**, No. 6763: 787 (1999).
19. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Москва: Физматгиз: 1962).
20. H. Böttger, *Principles of the Theory of Lattice Dynamics* (Berlin: Akademie-Verlag: 1983).
21. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (Москва: Наука: 1971).
22. И. З. Фишер, *Статистическая теория жидкостей* (Москва: Физматгиз: 1961).
23. J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94**, No. 6: 1498 (1954).
24. R. R. Sharma, *Phys. Rev. B*, **19**, No. 6: 2813 (1979).
25. P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18**, No. 3: 365 (1950).